

Attention Models: da motivação às variantes modernas

Intuição geométrica, formulação matemática e aplicações

Rodrigo Petrus Domingues, Felipe Grael e Vivian

17 de agosto de 2025

Table of Contents

1 Motivação e Histórico

- ▶ **Motivação e Histórico**
- ▶ Transformers
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ Séries Temporais
- ▶ Language Models
- ▶ Vision Transformer
- ▶ Graph Attention
- ▶ Referências Bibliográficas

Redes Neurais Recorrentes

1 Motivação e Histórico

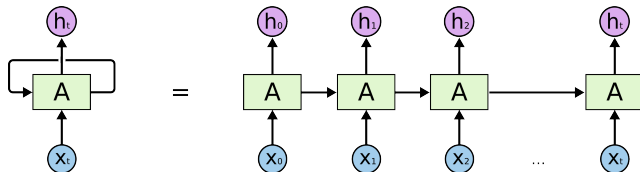


Figura: Redes Neurais Recorrentes ¹

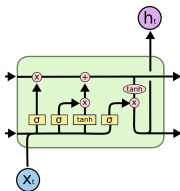
- Bem adaptadas para dados sequenciais como séries temporais e texto
- Diferentes tipos de modelos: LSTM, GRU
- Diferentes arquiteturas: simples, bidirecional, encoder-decoder

¹Figura de Christopher Olah

Tipos de camadas RNN

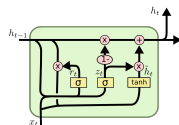
1 Motivação e Histórico

LSTM



$$\begin{aligned}
 f_t &= \sigma(W_f[h_{t-1}, x_t] + b_f), & i_t &= \sigma(W_i[h_{t-1}, x_t] + b_i), \\
 \tilde{C}_t &= \tanh(W_c[h_{t-1}, x_t] + b_c), & C_t &= f_t \odot C_{t-1} + i_t \odot \tilde{C}_t, \\
 o_t &= \sigma(W_o[h_{t-1}, x_t] + b_o), & h_t &= o_t \odot \tanh(C_t)
 \end{aligned}$$

GRU



$$\begin{aligned}
 z_t &= \sigma(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t]) \\
 r_t &= \sigma(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t]) \\
 \tilde{h}_t &= \tanh(W \cdot [r_t \odot h_{t-1}, x_t]) \\
 h_t &= (1 - z_t) \odot h_{t-1} + z_t \odot \tilde{h}_t
 \end{aligned}$$

LSTM como baseline para NMT

1 Motivação e Histórico

- Encoder LSTM lê (x_1, \dots, x_n) e produz estados h_t ; o contexto é o último estado $c = h_n$.
- Decoder LSTM gera (y_1, \dots, y_m) condicionado a c .
- **Gargalo:** toda a informação comprimida em $c = h_n$.
 - Processamento **sequencial** \Rightarrow baixa paralelização.
 - **Dependências longas** ainda são difíceis (mesmo com portas).
 - **Gargalo do contexto** (vetor único) degrada qualidade em frases longas.

Atenção aditiva [1]

1 Motivação e Histórico

$$e_{ij} = a(s_{i-1}, h_j), \quad \alpha_{ij} = \frac{\exp(e_{ij})}{\sum_{k=1}^{T_x} \exp(e_{ik})}, \quad c_i = \sum_{j=1}^{T_x} \alpha_{ij} h_j$$

- h_j : estado oculto do encoder na posição j (palavra x_j).
- s_{i-1} : estado do decoder no passo anterior (y_{i-1}).
- e_{ij} : escore de alinhamento entre h_j e s_{i-1} (via rede feedforward).
- α_{ij} : pesos normalizados (softmax) \rightarrow distribuem a atenção sobre os h_j .
- c_i : vetor de contexto dinâmico usado para prever y_i .

Intuição: O decoder calcula, em cada passo, um mapa de atenção sobre os estados do encoder, decidindo onde focar.

Integração com encoder bidirecional e decoder

1 Motivação e Histórico

- O **encoder** é uma RNN bidirecional:

$$h_j = [\vec{h}_j; \overleftarrow{h}_j]$$

Cada h_j contém contexto passado e futuro da palavra x_j .

- O vetor de contexto c_i é construído a partir desses estados bidirecionais.
- O **decoder** (RNN unidirecional) atualiza seu estado com:

$$s_i = f(s_{i-1}, y_{i-1}, c_i)$$

- Usa o estado anterior s_{i-1} - O símbolo anterior y_{i-1} - O contexto dinâmico c_i

- Assim, a cada passo, o decoder combina memória interna + contexto dinâmico para prever y_i .

Resultado: Resolve o gargalo do vetor fixo único (h_n) e permite traduções mais fiéis em frases longas.

Atenção multiplicativa [2]

1 Motivação e Histórico

Três variantes de scoring:

$$e_{ij} = v^\top \tanh(W[s_j; h_i]) \quad (\text{concat, similar ao Bahdanau})$$

$$e_{ij} = s_j^\top W h_i \quad (\text{general})$$

$$e_{ij} = s_j^\top h_i \quad (\text{dot})$$

- s_j : query \rightarrow estado oculto do decoder.
- h_i : key/value \rightarrow estado do encoder.
- **Concat**: aproxima-se da atenção aditiva de Bahdanau.
- **General**: bilinear, mais expressivo (aprende W).
- **Dot**: mais simples e rápido (nenhum parâmetro extra).

Nota: Podemos reinterpretar em termos modernos como $Q = s_j$, $K = h_i$, $V = h_i$.

Global vs Local Attention [2]

1 Motivação e Histórico

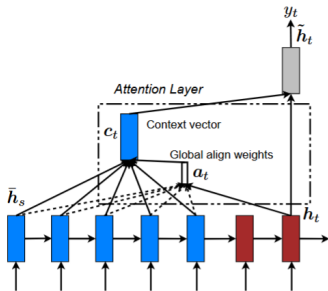


Figure 2: **Global attentional model** – at each time step t , the model infers a *variable-length* alignment weight vector a_t based on the current target state h_t and all source states \bar{h}_s . A global context vector c_t is then computed as the weighted average, according to a_t , over all the source states.

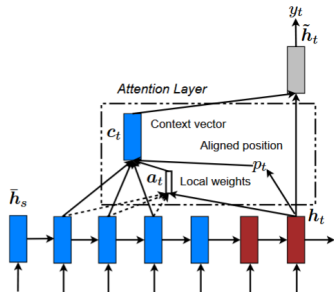


Figure 3: **Local attention model** – the model first predicts a single aligned position p_t for the current target word. A window centered around the source position p_t is then used to compute a context vector c_t , a weighted average of the source hidden states in the window. The weights a_t are inferred from the current target state h_t and those source states \bar{h}_s in the window.

Self-Attention: dependências em paralelo

1 Motivação e Histórico

$$\text{Att}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^\top}{\sqrt{d_k}}\right) V, \quad Q = XW_Q, \quad K = XW_K, \quad V = XW_V.$$

- Calcula relações *entre todos os tokens* da mesma sequência, **em paralelo**.
- Multi-head:

$$\text{MHA}(X) = \text{Concat}(H_1, \dots, H_h) W_O, \quad H_r = \text{softmax}\left(\frac{Q_r K_r^\top}{\sqrt{d_k}}\right) V_r.$$

- Comparativo: RNN/LSTM exige n passos sequenciais; self-attention faz um passo paralelo com custo $\mathcal{O}(n^2)$.

Arquitetura pré-transformer

1 Motivação e Histórico

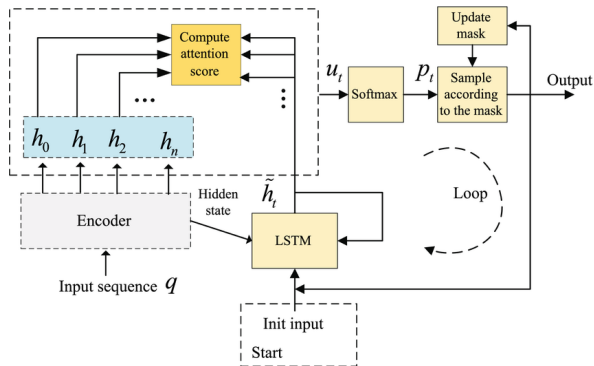


Figura: Exemplo de arquitetura pré-transformer (aditiva) [3]

Table of Contents

2 Transformers

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ **Transformers**
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ Séries Temporais
- ▶ Language Models
- ▶ Vision Transformer
- ▶ Graph Attention
- ▶ Referências Bibliográficas

Attention Is All You Need [4]: nascendo o Transformer

2 Transformers

- **Remove** completamente a recorrência (sem LSTM).
- **Positional encodings** preservam ordem:

$$PE_{(pos,2i)} = \sin\left(\frac{pos}{10000^{2i/d_{\text{model}}}}\right), \quad PE_{(pos,2i+1)} = \cos\left(\frac{pos}{10000^{2i/d_{\text{model}}}}\right).$$

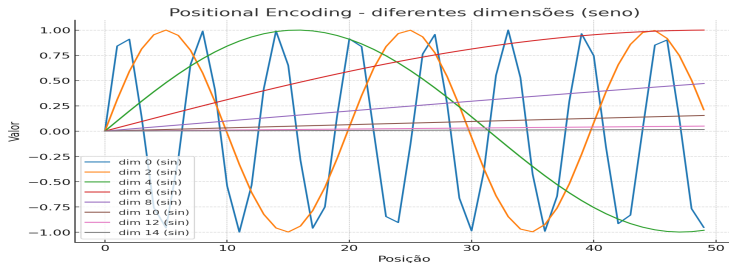


Figura: Exemplo de codificação posicional senoidal [4]

Bloco Transformer e arquitetura

2 Transformers

- Cada **bloco Transformer** (pré-norm, forma comum):

$$Y = X + \text{MHA}(\text{LN}(X)),$$

$$Z = Y + \text{FFN}(\text{LN}(Y)), \quad \text{FFN}(u) = W_2 \phi(W_1 u + b_1) + b_2,$$

- Empilha-se vários blocos de atenção+FFN \Rightarrow **arquitetura Transformer**.
- **Máscara causal** (para LMs) impede olhar o futuro:

$$\text{softmax}\left(\frac{QK^\top}{\sqrt{d_k}} + M\right), \quad M_{ij} = \begin{cases} 0, & j \leq i \\ -\infty, & j > i \end{cases}$$

Arquiteturas Transformer e Aplicações

2 Transformers

Encoder-Decoder

(Transformer original, 2017)

- Tradução automática
- Sumarização
- Diálogo
- Captioning

Encoder-only

(BERT, RoBERTa, DistilBERT)

- Classificação de texto
- NER (entidades)
- QA (extração de trechos)
- Análise semântica

Decoder-only

(GPT, LLaMA, etc.)

- Modelos de linguagem
- Geração de texto
- Completamento de prompts
- Story generation

Arquiteturas Transformer: encoder e decoder [4]

2 Transformers

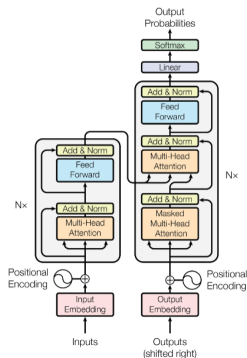


Figura: Transformer Encoder e Decoder
16/43

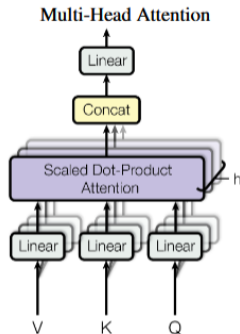


Figura: Multi-Head Attention

Scaled Dot-Product Attention

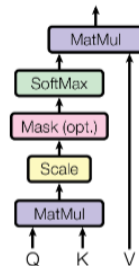


Figura: Multi-Head Attention

Resumo da evolução dos modelos

2 Transformers

Linha do tempo (síntese):

- LSTM encoder-decoder: contexto único $c = h_n$ (gargalo).
- LSTM + **atenção** (Bahdanau/Luong): alívio do gargalo.
- **Self-attention**: dependências longas em paralelo.
- **Transformer**: atenção + posição + FFN; várias camadas empilhadas; sem LSTM.

Table of Contents

3 Embeddings & Interpretações

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ Transformers
- ▶ **Embeddings & Interpretações**
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ Séries Temporais
- ▶ Language Models
- ▶ Vision Transformer
- ▶ Graph Attention
- ▶ Referências Bibliográficas

Word/Subword Embeddings

3 Embeddings & Interpretações

- Estáticos (Word2Vec, GloVe) vs. Contextuais (ELMo, BERT)
- Subword (BPE/Unigram) para robustez morfológica
- Análogos em outras modalidades: patches (ViT), time2vec (TS), node2vec (grafos)

Atenção: projeções e compatibilidade

3 Embeddings & Interpretações

- Projeções lineares:**

$$Q = XW_Q, K = XW_K, V = XW_V.$$

- Compatibilidade:** $e_i = \frac{\langle q, k_i \rangle}{\sqrt{d}}$ (ou cosseno se normalizar).

- Pesos:**

$$\alpha_i = \text{softmax}(e_i) \Rightarrow \alpha_i \geq 0, \sum_i \alpha_i = 1.$$

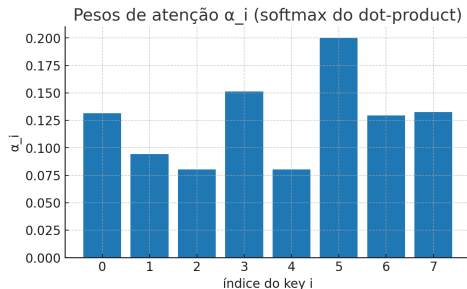
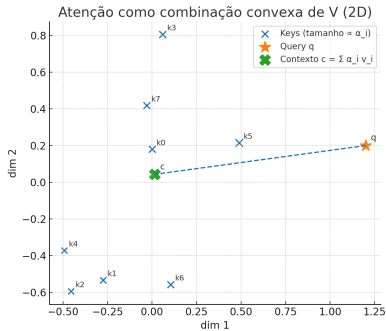


Figura: Pesos α_i (softmax do dot-product)

Interpretação Geométrica: contexto = barycenter

3 Embeddings & Interpretações

- **Contexto:** $c = \sum_i \alpha_i v_i \in \text{conv}\{v_i\} \Rightarrow$ combinação *convexa* dos values.
- **Geometria:** níveis de igual peso são hiperplanos ortogonais a q ; pesos crescem exponencialmente com o alinhamento entre q e k_i .



Multi-head: múltiplas projeções/métricas

3 Embeddings & Interpretações

- Cada head aplica $(W_Q^{(h)}, W_K^{(h)}, W_V^{(h)})$ e induz uma métrica interna distinta:

$$\langle x, y \rangle_h = x^\top W_Q^{(h)} W_K^{(h)\top} y.$$

- Heads diferentes \rightarrow diferentes pesos $\alpha^{(h)}$ e contextos $c^{(h)}$; a saída concatena/combina esses subespaços.

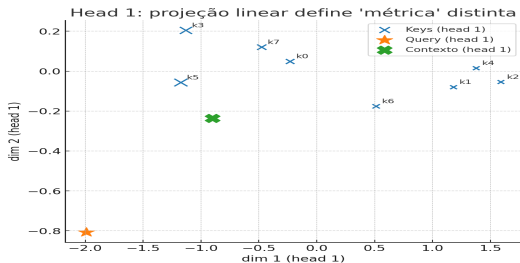


Figura: Head 1

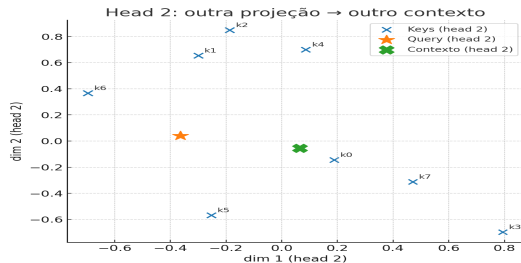


Figura: Head 2

Interpretação Matemática: Self-Attention

3 Embeddings & Interpretações

Fórmula central (scaled dot-product)

$$\text{Att}(Q, K, V) = \text{softmax}\left(\frac{QK^{\top}}{\sqrt{d_k}}\right) V$$

- Máscara causal/atencional conforme a tarefa
- Complexidade $\mathcal{O}(n^2)$ em tempo/memória
- Gradientes e saturação da softmax

Positional Encodings — Absolutos

3 Embeddings & Interpretações

- **Senoidais [4]:**

$$PE(pos, 2i) = \sin\left(\frac{pos}{10000^{2i/d}}\right), \quad PE(pos, 2i+1) = \cos\left(\frac{pos}{10000^{2i/d}}\right)$$

- Frequências diferentes em cada dimensão.
- Permitem extrapolação por periodicidade.
- Risco: aliasing (padrões que se repetem em posições distantes).

- **Aprendidos:**

$$z_{pos} = x_{pos} + P_{pos}, \quad P \in \mathbb{R}^{L_{\max} \times d}$$

- Mais flexíveis e adaptados à tarefa.
- **Limite:** não extrapolam para posições $> L_{\max}$.

Positional Encodings — Relativos e Bias

3 Embeddings & Interpretações

- Shaw et al. (2018):

$$e_{ij} = q_i^\top (k_j + r_{i-j})$$

ou com bias b_{i-j} . Codifica **distâncias** em vez de posições absolutas.

- T5 (Raffel et al., 2020):

$$e_{ij} = q_i^\top k_j + B_{\text{bucket}(i-j)}$$

- “Baldes” de distâncias (log-escalados).
- Barato, simples, bom para extrapolação moderada.

- ALiBi (Press et al., 2022):

$$e_{ij} + m_h(i - j)$$

- Inclinação linear por head.
- Suporta janelas muito maiores sem retraining.
- Praticamente custo zero.

Positional Encodings — RoPE e Impacto Prático

3 Embeddings & Interpretações

- **RoPE (Su et al., 2021):** aplica rotação dependente da posição:

$$\tilde{x}_{2i}, \tilde{x}_{2i+1} = \begin{cases} x_{2i} \cos \theta - x_{2i+1} \sin \theta \\ x_{2i} \sin \theta + x_{2i+1} \cos \theta \end{cases}, \quad \theta = \frac{pos}{10000^{2i/d}}$$

- Produto $q^\top k$ passa a depender de $(pos_q - pos_k)$.
- \Rightarrow natural para codificar deslocamentos/ordem relativa.

- **Impacto prático:**

- Absolutos aprendidos: limitados ao L_{\max} .
- Senoidais: extrapolam mas sofrem com aliasing.
- Relativos (T5, ALiBi, RoPE): melhor estabilidade para contextos longos.

- **Hoje:** ALiBi e RoPE são o padrão em LLMs de longo contexto.

Table of Contents

4 Treino & Hiperparâmetros

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ Transformers
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros**
- ▶ Séries Temporais
- ▶ Language Models
- ▶ Vision Transformer
- ▶ Graph Attention
- ▶ Referências Bibliográficas

Práticas de Treino

4 Treino & Hiperparâmetros

- AdamW, warmup + decaimento; label smoothing quando aplicável
- Regularização: dropout, stochastic depth, weight decay
- AMP/mixed precision, grad clipping, checkpointing
- Dados: curriculum, masking, augmentation (TS/ViT/GAT)

Hiperparâmetros Essenciais

4 Treino & Hiperparâmetros

- Profundidade, d_{model} , #heads, d_{ff} , dropout
- Comprimento de contexto, batch size, *LR schedule*
- Específicos: tokenização (LM), *patch size* (ViT), janela/patch (TS)

Qual tamanho ideal? (Scaling)

4 Treino & Hiperparâmetros

- **Leis de escala [5]:** desempenho cresce com \uparrow dados, parâmetros e compute, até saturar.
- **Trade-offs:** muitos parâmetros + poucos dados \rightarrow overfitting; muitos dados + poucos parâmetros \rightarrow subutilização.
- **Tokens vs. parâmetros:** ideal quando $\#tokens \approx$ múltiplos de $\#parâmetros$ [6].
- **Contexto:** janelas maiores ajudam, mas ganhos saturam.
- **Regra prática:** dimensione conforme dataset + compute + budget de inferência.

Resumo: não há tamanho ótimo universal — depende do equilíbrio entre dados, parâmetros e recursos disponíveis.

Table of Contents

5 Séries Temporais

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ Transformers
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ **Séries Temporais**
- ▶ Language Models
- ▶ Vision Transformer
- ▶ Graph Attention
- ▶ Referências Bibliográficas

Atenção em Séries Temporais

5 Séries Temporais

- **Codificação temporal:** absolutos/relativos; *Time2Vec*; embeddings de calendário (hora/dia/sazonalidade).
- **Exógenas + cross-attention:** integrar variáveis externas (clima, preços, feriados) à série-alvo.
- **Contextos longos:** *patching* (janelas), sparsity e hashing; ganhos de janelas muito grandes tendem a saturar.
- **Por que atenção:** foca nos trechos relevantes do histórico e alinha padrões não estacionários/irregulares.
- **Tarefas:** previsão (forecasting), imputação (faltantes) e detecção de anomalias.

Modelos recentes (com código)

5 Séries Temporais

- Informer (AAAI'21) — atenção esparsa p/ sequências longas.
- Autoformer (NeurIPS'21) — auto-correlação + decomposição.
- PatchTST (ICLR'23) — *patching* / channel-independent.
- TimesNet (ICLR'23) — modelagem de variação temporal 2D.
- TSDiffusion (2023) - difusão para séries temporais.

Table of Contents

6 Language Models

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ Transformers
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ Séries Temporais
- ▶ **Language Models**
- ▶ Vision Transformer
- ▶ Graph Attention
- ▶ Referências Bibliográficas

Language Models (LM)

6 Language Models

- **Atenção causal** (*masked self-attention*): máscara triangular impede olhar o futuro.
- **Objetivo autoregressivo**: minimizar $-\sum_t \log p(x_t | x_{<t})$ (*next-token*).
- **Pré-treino** (corpus amplo, tarefa genérica) **vs. fine-tuning** (tarefa/estilo): *instruction tuning* (FLAN), RLHF (InstructGPT).
- **PEFT** (ajuste eficiente): *LoRA*, *Adapters* (congelar base + poucos params).
- **Métricas**: *perplexity* (surpresa média por token) e *downstream* (ex.: SuperGLUE, MMLU).

Language Models — Implementações (GitHub)

6 Language Models

- karpathy/nanoGPT (**2022**) — GPT minimalista
- huggingface/transformers (**2019**) — biblioteca SOTA
- EleutherAI/gpt-neox (**2022**) — treino LLMs em larga escala
- meta-llama/llama (**2023**) — código/pesos Llama
- harvardnlp/annotated-transformer (**2018**) — Transformer anotado
- huggingface/trl (**2020**) — SFT, PPO/DPO, RLHF
- DeepSpeed-Chat (**2023**) — pipeline RLHF
- OpenRLHF/OpenRLHF (**2023**) — RLHF escalável
- huggingface/peft (**2023**) — PEFT (LoRA, QLoRA, etc.)
- adapter-hub/adapters (**2020**) — biblioteca de Adapters
- microsoft/LoRA (**2021**) — implementação LoRA oficial
- google-research/FLAN (**2021**) — dados p/ instruction tuning

Table of Contents

7 Vision Transformer

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ Transformers
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ Séries Temporais
- ▶ Language Models
- ▶ **Vision Transformer**
- ▶ Graph Attention
- ▶ Referências Bibliográficas

Vision Transformer (ViT)

7 Vision Transformer

- Imagem \rightarrow *patches* + [CLS] token
- Posicionais 2D; augmentations (RandAug, Mixup/CutMix)
- Transfer: *linear probe* vs. *fine-tune*

Table of Contents

8 Graph Attention

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ Transformers
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ Séries Temporais
- ▶ Language Models
- ▶ Vision Transformer
- ▶ **Graph Attention**
- ▶ Referências Bibliográficas

Graph Attention Networks (GAT)

8 Graph Attention

Coeficientes de Atenção (um cabeçalho)

$$\alpha_{ij} = \text{softmax}_j(\text{LeakyReLU}(a^\top [Wh_i || Wh_j]))$$

- Multi-head; sobre-*smoothing* e escalabilidade
- Heterógrafos e atenção relacional

Table of Contents

9 Referências Bibliográficas

- ▶ Motivação e Histórico
- ▶ Transformers
- ▶ Embeddings & Interpretações
- ▶ Treino & Hiperparâmetros
- ▶ Séries Temporais
- ▶ Language Models
- ▶ Vision Transformer
- ▶ Graph Attention
- ▶ **Referências Bibliográficas**

Referências Bibliográficas

9 Referências Bibliográficas

- [1] D. Bahdanau, K. Cho, and Y. Bengio, “Neural machine translation by jointly learning to align and translate,” *arXiv preprint arXiv:1409.0473*, 2014.
- [2] M.-T. Luong, H. Pham, and C. D. Manning, “Effective approaches to attention-based neural machine translation,” in *Proceedings of the 2015 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP)*, pp. 1412–1421, 2015.
- [3] S. Gu and Y. Zhuang, “Method for solving constrained 0-1 quadratic programming problems based on pointer network and reinforcement learning,” *Neural Computing and Applications*, vol. 35, 2022.

Referências Bibliográficas

9 Referências Bibliográficas

- [4] A. Vaswani, N. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, L. Jones, A. N. Gomez, L. Kaiser, and I. Polosukhin, "Attention is all you need," in *Advances in Neural Information Processing Systems*, vol. 30, 2017.
- [5] J. Kaplan, S. McCandlish, T. Henighan, T. B. Brown, B. Chess, R. Child, S. Gray, A. Radford, J. Wu, and D. Amodei, "Scaling laws for neural language models," *arXiv preprint arXiv:2001.08361*, 2020.
- [6] J. Hoffmann, S. Borgeaud, A. Mensch, E. Buchatskaya, T. Cai, E. Rutherford, D. d. L. Casas, L. A. Hendricks, J. Welbl, A. Clark, T. Hennigan, J. Noland, K. Millican, G. v. d. Driessche, B. Damoc, A. Guy, S. Osindero, K. Simonyan, E. Elsen, J. W. Rae, O. Vinyals, and L. Sifre, "Training compute-optimal large language models," *arXiv preprint arXiv:2203.15556*, 2022.