缓存与效果的极限拉扯：从MHA、MQA、GQA到MLA

原文地址： https://spaces.ac.cn/archives/10091 本文为其修改精简版本

关键概念：

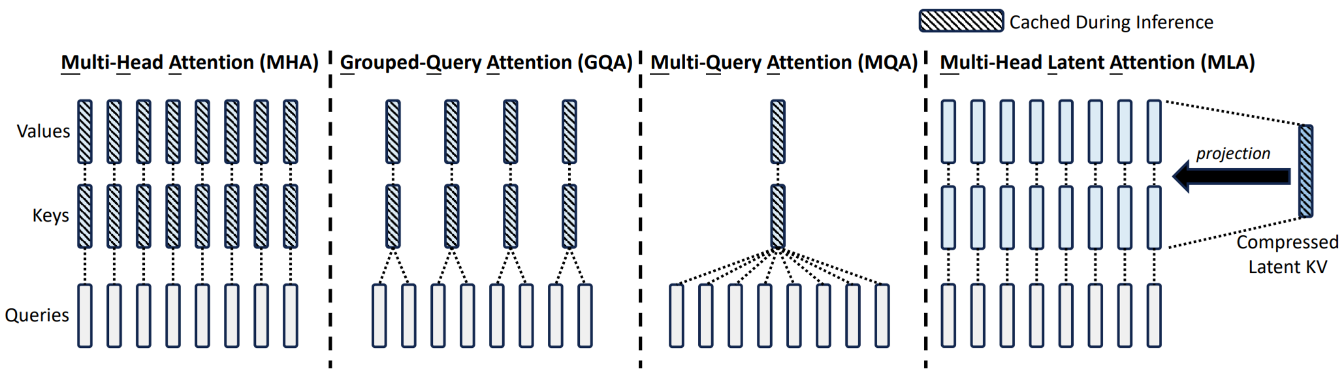
多头注意力（Multi-Head Attention, MHA） 分组查询注意力（Grouped Query Attention, GQA）

多查询注意力（Multi-Query Attention, MQA） 多头潜变量注意力（Multi-Head Latent Attention, MLA）

KV Cache

内容目录：

总览： 本文概述了四种注意力机制——多头注意力（MHA）、分组查询注意力（GQA）、多查询注意力（MQA）以及多头潜变量注意力（MLA）。它们体现了注意力结构在**推理效率优化**上的演进路径：从最初的多头并行设计，到逐步减少键值存储的冗余，再到利用潜变量表示进一步压缩存储开销。特别是 MLA，通过将键（Key）和值（Value）联合编码为紧凑的潜在向量，在推理阶段显著降低了 KV Cache 缓存大小，为大规模模型的高效部署开辟了新方向。下图给出了一个直观的简化示意。



MHA (Multi-Head Attention)

MHA（Multi-Head Attention） 等价于多个独立的单头注意力拼接而成。 假设输入的向量序列为 $\{x_1, x_2, \cdots, x_l\}$，其中 $x_i \in \mathbb{R}^d$。 在主流自回归 LLM 所用的 **Causal Attention** 中，MHA 可形式化记为：

$$\boldsymbol{o}_t = \left[\boldsymbol{o}_t^{(1)}, \boldsymbol{o}_t^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{o}_t^{(h)}\right]$$

$$\boldsymbol{o}_t^{(s)} = Attention\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}, \boldsymbol{k}_{\leq t}^{(s)}, \boldsymbol{v}_{\leq t}^{(s)}\right) \triangleq \frac{\sum_{i\leq t} \exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)} \boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right) \boldsymbol{v}_i^{(s)}}{\sum_{i\leq t} \exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)} \boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right)}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{q}_i^{(s)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d\times d_k} \\
\boldsymbol{k}_i^{(s)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_k^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad \boldsymbol{W}_k^{(s)} \in \mathbb{R}^{d\times d_k} \\
\boldsymbol{v}_i^{(s)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_v^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_v}, \quad \boldsymbol{W}_v^{(s)} \in \mathbb{R}^{d\times d_v}
\end{aligned}$$

KV Cache 在 token-by-token 递归生成时，新预测出来的第 $t+1$ 个 token 并不会影响到已计算的 $\boldsymbol{k}_{\leq t}^{(s)}, \boldsymbol{v}_{\leq t}^{(s)}$，因此这部分结果可以缓存下来，供后续生成调用，从而避免不必要的重复计算。

然而，在长上下文推理中，KV Cache 的存储量会随着上下文长度和注意力头数线性增长，对显存和内存造成巨大压力。这种高占用会限制推理批量（batch size）和可处理的上下文长度，因此**减少 KV Cache 的开销**成为优化推理效率的重要方向。减少 KV Cache 的主要目标是：

- 在更少的设备上推理更长的上下文（Context）；
- 在相同 Context 长度下支持更大的推理 batch size。

这不仅可以加快推理速度、提升吞吐量，还能显著降低推理成本。

MQA（Multi-Query Attention）

论文地址：Fast Transformer Decoding: One Write-Head is All You Need

代表模型：PaLM、StarCoder、Gemini

在多头注意力（MHA）中，每个 Attention Head 都会维护自己独立的键（Key）和值（Value）序列，因此 KV Cache 的存储量会随着注意力头数 h 成倍增加。这在长上下文推理中会带来非常高的显存开销。

MQA (Multi-Query Attention) 的核心思想是**让所有 Attention Head 共享同一个 K、V**，即取消 MHA 中所有 k, v 的上标 (s):

$$\boldsymbol{o}_t = \left[\boldsymbol{o}_t^{(1)}, \boldsymbol{o}_t^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{o}_t^{(h)}\right]$$

$$\boldsymbol{o}_t^{(s)} = Attention\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}, \boldsymbol{k}_{\leq t}^{\cancel{(s)}}, \boldsymbol{v}_{\leq t}^{\cancel{(s)}}\right) \triangleq \frac{\sum_{i\leq t} \exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)} \boldsymbol{k}_i^{\cancel{(s)}\top}\right) \boldsymbol{v}_i^{\cancel{(s)}}}{\sum_{i\leq t} \exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)} \boldsymbol{k}_i^{\cancel{(s)}\top}\right)}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{q}_i^{(s)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad & \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d \times d_k} \\
\boldsymbol{k}_i^{\cancel{(s)}} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_k^{\cancel{(s)}} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad & \boldsymbol{W}_k^{\cancel{(s)}} \in \mathbb{R}^{d \times d_k} \\
\boldsymbol{v}_i^{\cancel{(s)}} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_v^{\cancel{(s)}} \in \mathbb{R}^{d_v}, \quad & \boldsymbol{W}_v^{\cancel{(s)}} \in \mathbb{R}^{d \times d_v}
\end{aligned}$$

这样一来，KV Cache 的大小直接减少到原来的 $1/h$，显存占用得到了极大优化——从节省空间的角度来看几乎接近“天花板级别”的压缩效果。

在性能方面，目前研究表明 MQA 在大多数任务上的精度损失有限，且支持者认为这部分差距可以通过额外训练来弥补。此外，由于共享 K、V，Attention 层的参数量减少近一半，因此在保持模型总参数量不变的前提下，通常会增大 FFN/GLU 的规模，这也能部分抵消精度下降的影响。

GQA（Grouped-Query Attention）

论文地址：GQA: Training Generalized Multi-Query Transformer Models from Multi-Head Checkpoints

代表模型：Meta 开源的 LLAMA2-70B 以及 LLAMA3 全系列，TigerBot、DeepSeek-V1、StarCoder2、Yi、ChatGLM2、ChatGLM3 等。

在多头注意力（MHA）中，所有 h 个注意力头都各自存储一份键（Key）和值（Value），这会让 KV Cache 占用显存的规模与 h 成正比。虽然 MQA 通过让所有 Head 共享同一个 K、V 把显存压缩到了极致，但可能带来一定精度下降。GQA（Grouped-Query Attention）设计了一种折中方案：将 h 个 Attention Head 划分为 g 个组（g 可整除 h），每组共享同一对 K、V。数学表示为：

$$\boldsymbol{o}_t = \left[\boldsymbol{o}_t^{(1)}, \boldsymbol{o}_t^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{o}_t^{(h)}\right]$$

$$\boldsymbol{o}_t^{(s)} = Attention\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}, \boldsymbol{k}_{\le t}^{(\lceil sg/h\rceil)}, \boldsymbol{v}_{\le t}^{(\lceil sg/h\rceil)}\right) \triangleq \frac{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(\lceil sg/h\rceil)\top}\right)\boldsymbol{v}_i^{(\lceil sg/h\rceil)}}{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(\lceil sg/h\rceil)\top}\right)}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{q}_i^{(s)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d\times d_k} \\
\boldsymbol{k}_i^{(\lceil sg/h\rceil)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_k^{(\lceil sg/h\rceil)} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad \boldsymbol{W}_k^{(\lceil sg/h\rceil)} \in \mathbb{R}^{d\times d_k} \\
\boldsymbol{v}_i^{(\lceil sg/h\rceil)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_v^{(\lceil sg/h\rceil)} \in \mathbb{R}^{d_v}, \quad \boldsymbol{W}_v^{(\lceil sg/h\rceil)} \in \mathbb{R}^{d\times d_v}
\end{aligned}$$

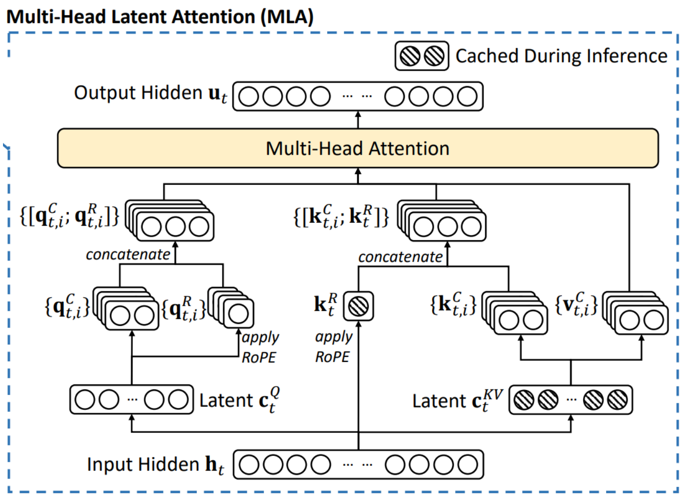
这里 $\lceil\cdot\rceil$ 表示上取整。当 $g = h$ 时，GQA 等价于 MHA；当 $g = 1$ 时，就完全变成了 MQA；而当 $1 < g < h$ 时，KV Cache 大小为原来的 g/h。

这种设计虽然压缩率不如 MQA，但提供了更大的自由度，可以在显存占用与性能损失之间找到更平衡的点，因此被很多大规模 LLM（如 LLaMA 系列）广泛采用。

MLA（Multi-head Latent Attention）

代表模型：DeepSeek-V2、DeepSeek-V3 等

在多头注意力中，即便采用了 GQA/MQA，推理阶段仍需缓存较高维度的 K、V 向量，占用大量显存。MLA（Multi-head Latent Attention）则提出通过**潜变量表示**进一步压缩 KV Cache，同时兼顾位置编码兼容性与训练显存优化。MLA 的框架直观示意图如下：



KV Cache 压缩 MLA 不直接缓存每个 Head 的 k_i, v_i，而是通过低秩投影将它们联合映射为一个共享的潜向量 c_i（维度更低）， 从而减少缓存。这一过程对应框架图中右路，形式化如下：

$$\boldsymbol{o}_t = \left[\boldsymbol{o}_t^{(1)}, \boldsymbol{o}_t^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{o}_t^{(h)}\right]$$

$$\boldsymbol{o}_t^{(s)} = Attention\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}, \boldsymbol{k}_{\le t}^{(s)}, \boldsymbol{v}_{\le t}^{(s)}\right) \triangleq \frac{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right)\boldsymbol{v}_i^{(s)}}{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right)}$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{q}_i^{(s)} &= \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad \boldsymbol{W}_q^{(s)} \in \mathbb{R}^{d\times d_k} \\
\boldsymbol{k}_i^{(s)} &= \boldsymbol{c}_i \boldsymbol{W}_k^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_k}, \quad \boldsymbol{W}_k^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_c\times d_k} \\
\boldsymbol{v}_i^{(s)} &= \boldsymbol{c}_i \boldsymbol{W}_v^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_v}, \quad \boldsymbol{W}_v^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_c\times d_v}
\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{c}_i = \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{W}_c \in \mathbb{R}^{d_c}, \quad \boldsymbol{W}_c \in \mathbb{R}^{d\times d_c},$$

对于推理阶段，此时需要利用缓存的 c_i 来进行推理，具体来说根据

$$\boldsymbol{q}_i^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(s)\top}=\left(x_t\boldsymbol{W}_q^{(s)}\right)\left(c_i\boldsymbol{W}_k^{(s)}\right)^\top=x_t\left(\boldsymbol{W}_q^{(s)}\boldsymbol{W}_k^{(s)\top}\right)c_i{}^\top$$

并将合并的权值矩阵作为Q的新投影矩阵来实现。同理，也可以对 v_i 进行处理 。

兼容 RoPE（旋转位置编码） 由于低秩压缩不兼容 RoPE（旋转位置编码），原因简要解释如下：由于之前只缓存了 c_i 来替代 k_i，这也使得没有缓存 $W_k^{(s)}$；根据 RoPE 的计算过程来看， 旋转位置编码以一个正交矩阵右乘的方式来作用在 $k_i^{(s)}$ 上，因此此时缺乏 $W_k^{(s)}$ 无法做到这一点； 直观上来看， 这个问题也可以理解为此时维度混合成低维表示，RoPE 的逐维相位信息已丢失。为了应对这个挑战，MLA 采用了一种折中方案：

- 在每个 Head 的 Q、K 向量中额外增加 d_r 维专门用于 RoPE；
- 其中 K 的 RoPE 维度在各 Head 间共享， 从而类似 MQA 节约显存；

这一过程对应框架图中的中路，主要目的是加入附加维度补偿位置信息，更精确的数学表达式如下：

$$\boldsymbol{o}_t=\left[\boldsymbol{o}_t^{(1)},\boldsymbol{o}_t^{(2)},\cdots,\boldsymbol{o}_t^{(h)}\right]$$

$$\boldsymbol{o}_t^{(s)}=Attention\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)},\boldsymbol{k}_{\le t}^{(s)},\boldsymbol{v}_{\le t}^{(s)}\right)\triangleq\frac{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right)\boldsymbol{v}_i^{(s)}}{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right)}$$

$$\begin{gathered}
\boldsymbol{q}_i^{(s)}=\left[\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_{qc}^{(s)},\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_{qr}^{(s)}\boldsymbol{\mathcal{R}}_i\right]\in\mathbb{R}^{d_k+d_r},\quad\boldsymbol{W}_{qc}^{(s)}\in\mathbb{R}^{d\times d_k},\boldsymbol{W}_{qr}^{(s)}\in\mathbb{R}^{d\times d_r}\\
\boldsymbol{k}_i^{(s)}=\left[\boldsymbol{c}_i\boldsymbol{W}_{kc}^{(s)},\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_{kr}^{\cancel{(s)}}\boldsymbol{\mathcal{R}}_i\right]\in\mathbb{R}^{d_k+d_r},\quad\boldsymbol{W}_{kc}^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_c\times d_k},\boldsymbol{W}_{kr}^{\cancel{(s)}}\in\mathbb{R}^{d\times d_r}\\
\boldsymbol{v}_i^{(s)}=\boldsymbol{c}_i\boldsymbol{W}_v^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_v},\quad\boldsymbol{W}_v^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_c\times d_v}
\end{gathered}$$

$$\boldsymbol{c}_i=\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_c\in\mathbb{R}^{d_c},\quad\boldsymbol{W}_c\in\mathbb{R}^{d\times d_c}$$

其中 $\mathcal{R}_i$ 为位置编码， 注意如果 K 的附加部分不共享，此时缓存跟 MLA 依旧类似因此起不到作用。

Query 低秩投影 为进一步减少训练期间的参数量和梯度显存占用，MLA 将 Q 的输入也改为低秩投影形式（与 KV Cache 压缩无关）。这部分对应框架图中的左路，数学形式化表达为：

$$\boldsymbol{o}_t=\left[\boldsymbol{o}_t^{(1)},\boldsymbol{o}_t^{(2)},\cdots,\boldsymbol{o}_t^{(h)}\right]$$

$$\boldsymbol{o}_t^{(s)}=Attention\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)},\boldsymbol{k}_{\le t}^{(s)},\boldsymbol{v}_{\le t}^{(s)}\right)\triangleq\frac{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right)\boldsymbol{v}_i^{(s)}}{\sum_{i\le t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{(s)\top}\right)}$$

$$\begin{gathered}
\boldsymbol{q}_i^{(s)}=\left[\boldsymbol{c}_i'\boldsymbol{W}_{qc}^{(s)},\boldsymbol{c}_i'\boldsymbol{W}_{qr}^{(s)}\boldsymbol{\mathcal{R}}_i\right]\in\mathbb{R}^{d_k+d_r},\quad\boldsymbol{W}_{qc}^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_c'\times d_k},\boldsymbol{W}_{qr}^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_c'\times d_r}\\
\boldsymbol{k}_i^{(s)}=\left[\boldsymbol{c}_i\boldsymbol{W}_{kc}^{(s)},\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_{kr}^{\cancel{(s)}}\boldsymbol{\mathcal{R}}_i\right]\in\mathbb{R}^{d_k+d_r},\quad\boldsymbol{W}_{kc}^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_c\times d_k},\boldsymbol{W}_{kr}^{\cancel{(s)}}\in\mathbb{R}^{d\times d_r}\\
\boldsymbol{v}_i^{(s)}=\boldsymbol{c}_i\boldsymbol{W}_v^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_v},\quad\boldsymbol{W}_v^{(s)}\in\mathbb{R}^{d_c\times d_v}
\end{gathered}$$

$$\begin{gathered}
\boldsymbol{c}_i'=\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_c'\in\mathbb{R}^{d_c'},\quad\boldsymbol{W}_c'\in\mathbb{R}^{d\times d_c'}\\
\boldsymbol{c}_i=\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_c\in\mathbb{R}^{d_c},\quad\boldsymbol{W}_c\in\mathbb{R}^{d\times d_c}
\end{gathered}$$

MLA 推理阶段总结 整个框架的推理阶段的计算过程重新表达成 MQA 的形式为

$$
\boldsymbol{o}_t = \left[\boldsymbol{o}_t^{(1)}\boldsymbol{W}_v^{(1)}, \boldsymbol{o}_t^{(2)}\boldsymbol{W}_v^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{o}_t^{(h)}\boldsymbol{W}_v^{(h)}\right]
$$

$$
\boldsymbol{o}_t^{(s)} = Attention\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}, \boldsymbol{k}_{\leq t}^{\cancel{(s)}}, \boldsymbol{c}_{\leq t}\right) \triangleq \frac{\sum_{i\leq t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{\cancel{(s)}\top}\right)\boldsymbol{c}_i}{\sum_{i\leq t}\exp\left(\boldsymbol{q}_t^{(s)}\boldsymbol{k}_i^{\cancel{(s)}\top}\right)}
$$

$$
\begin{gathered}
\boldsymbol{q}_i^{(s)} = \left[\boldsymbol{c}_i'\boldsymbol{W}_{qc}^{(s)}\boldsymbol{W}_{kc}^{(s)\top}, \boldsymbol{c}_i'\boldsymbol{W}_{qr}^{(s)}\boldsymbol{\mathcal{R}}_i\right] \in \mathbb{R}^{d_c+d_r} \\
\boldsymbol{k}_i^{\cancel{(s)}} = \left[\boldsymbol{c}_i, \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_{kr}^{\cancel{(s)}}\boldsymbol{\mathcal{R}}_i\right] \in \mathbb{R}^{d_c+d_r} \\
\boldsymbol{W}_{qc}^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_c'\times d_k}, \boldsymbol{W}_{kc}^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_c\times d_k}, \boldsymbol{W}_{qr}^{(s)} \in \mathbb{R}^{d_c'\times d_r}, \boldsymbol{W}_{kr}^{\cancel{(s)}} \in \mathbb{R}^{d\times d_r}
\end{gathered}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{c}_i' = \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_c' \in \mathbb{R}^{d_c'}, &\quad \boldsymbol{W}_c' \in \mathbb{R}^{d\times d_c'} \\
\boldsymbol{c}_i = \boldsymbol{x}_i\boldsymbol{W}_c \in \mathbb{R}^{d_c}, &\quad \boldsymbol{W}_c \in \mathbb{R}^{d\times d_c}
\end{aligned}
$$

转换后，Q、K 的 Head Size 变为 $d_c + d_r$，V 的 Head Size 为 d_c（原论文设置下是 d_k, d_v 的 4 倍）。虽然这会增加一定的计算量，但推理阶段的大模型通常受带宽和显存限制更大，因此整体推理效率依然提升。

References

[1] Liu A, Feng B, Wang B, et al. "Deepseek-v2: A strong, economical, and efficient mixture-of-experts language model." arXiv preprint arXiv:2405.04434, 2024.

[2] Liu A, Feng B, Xue B, et al. "Deepseek-v3 technical report". arXiv preprint arXiv:2412.19437, 2024.

[3] N Shazeer et al. "Fast Transformer Decoding: One Write-Head is All You Need" arXiv preprint arXiv:1911.02150, 2019.

[4] J Ainslie et al. "GQA: Training Generalized Multi-Query Transformer Models from Multi-Head Checkpoints" arXiv preprint arXiv:2305.13245, 2023.