上一章中，我们讨论了大语言模型（例如，Transformer）的模型结构。
在本章中，我们将讨论如何训练大语言模型。
本章分成目标函数和优化算法两部分。

8.1 目标函数

我们研究三类语言模型的目标函数：

1. 只包含解码器（Decoder-only）的模型（例如，GPT-3）：计算单向上下文嵌入（contextual embeddings），一次生成一个token
2. 只包含编码器（Encoder-only）的模型（例如，BERT）：计算双向上下文嵌入
3. 编码器解码器（Encoder-decoder）模型（例如，T5）：编码输入，解码输出

我们可以使用任何模型将token序列映射到上下文嵌入中（例如，LSTM、Transformers）：

$$\phi : V^L \rightarrow \mathbb{R}^{d \times L}.$$

$$[\text{the}, \text{mouse}, \text{ate}, \text{the}, \text{cheese}] \overset{\phi}{\Rightarrow} \left[\begin{pmatrix}1\\0.1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1\\-0.1\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}0\\-1\end{pmatrix}\right].$$

8.1.1 Decoder-only 模型

回想一下，自回归语言模型定义了一个条件分布：

$$p(x_i \mid x_{1:i-1}).$$

我们将其定义如下：

- 将$x_{1:i-1}$映射到上下文嵌入$\phi(x_{1:i-1})$。
- 应用嵌入矩阵$E \in \mathbb{R}^{V \times d}$来获得每个token的得分$E\phi(x_{1:i-1})_{i-1}$。
- 对其进行指数化和归一化，得到预测x_i的分布。

简洁地：

$$p(x_{i+1} \mid x_{1:i}) = softmax(E\phi(x_{1:i})_i).$$

8.1.1.1 最大似然

设θ是大语言模型的所有参数。设D是由一组序列组成的训练数据。然后，我们可以遵循最大似然原理，定义以下负对数似然目标函数：

$$O(\theta) = \sum_{x \in D} -\log p_\theta(x) = \sum_{x \in D} \sum_{i=1}^{L} -\log p_\theta(x_i \mid x_{1:i-1}).$$

并且，有很多的方法可以有效地优化这一目标函数。

8.1.2 Encoder-only 模型

8.1.2.1 单向到双向

使用上述最大似然可以训练得到Decoder-only模型，它会产生（单向）上下文嵌入。但如果我们不需要生成，我们可以提供更强的双向上下文嵌入。

8.1.2.2 BERT

我们首先介绍BERT的目标函数，它包含以下两个部分：

- 掩码语言模型（Masked language modeling）
- 下一句预测（Next sentence prediction）

以自然语言推理（预测隐含、矛盾或中性）任务中的序列为例：

$$x_{1:L} = [[\mathrm{CLS}], \mathrm{all}, \mathrm{animals}, \mathrm{breathe}, [\mathrm{SEP}], \mathrm{cats}, \mathrm{breathe}].$$

其中有两个特殊的token：

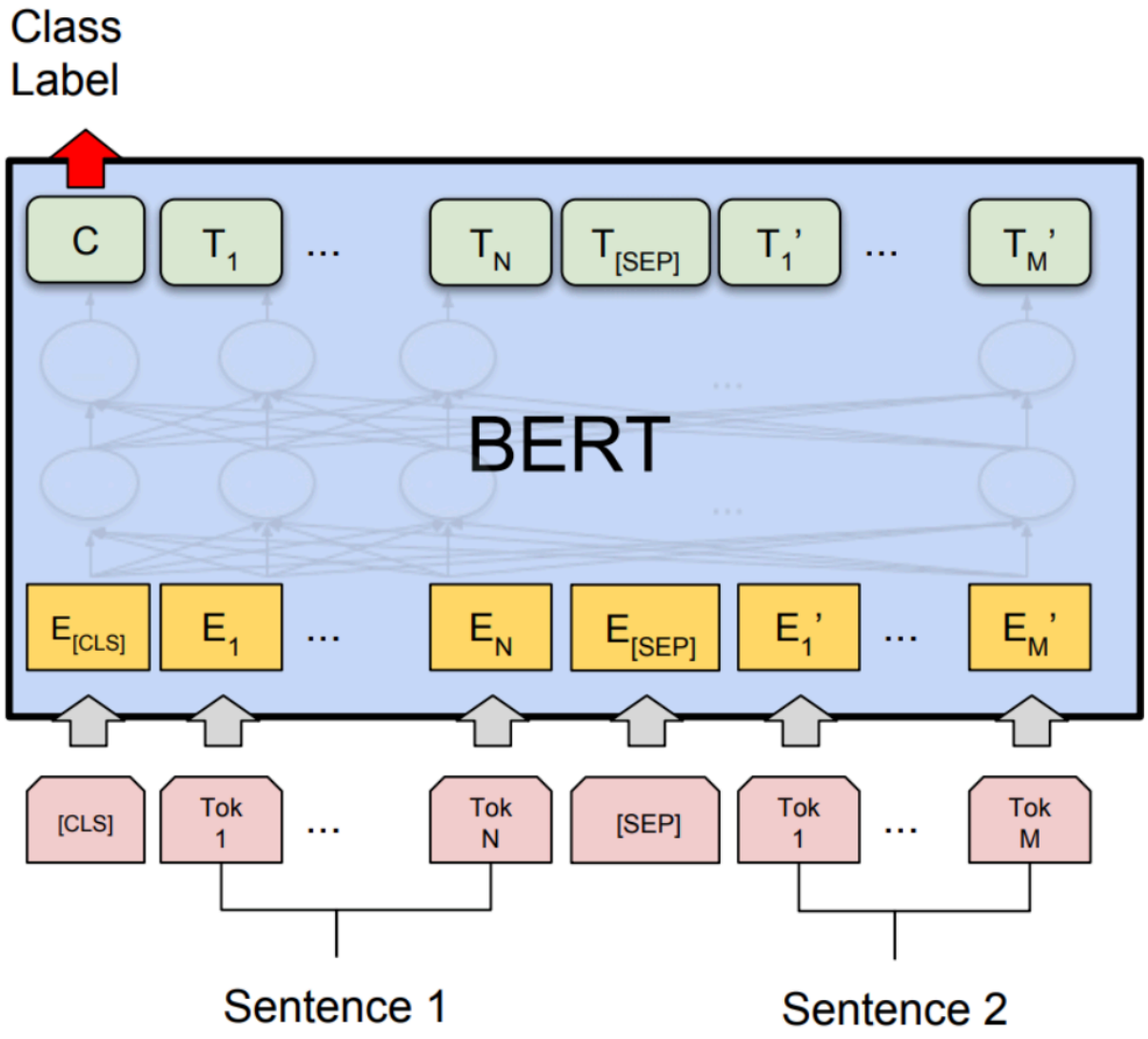
- $[\mathrm{CLS}]$：包含用于驱动分类任务的嵌入
- $[\mathrm{SEP}]$：用于告诉模型第一个序列（例如，前提）与第二个序列（例如，假设）的位置。

根据上一章的公式，BERT模型定义为：

$$\mathrm{BERT}(x_{1:L}) = \mathrm{TransformerBlock}^{24}(\mathrm{EmbedTokenWithPosition}(x_{1:L}) + \mathrm{SentenceEmbedding}(x_{1:L})) \in \mathbb{R}^{d \times L},$$

其中，$\mathrm{SentenceEmbedding}(x_{1:L})$根据序列返回以下两个矢量之一

- 对于$[\mathrm{SEP}]$左边的，返回$e_A \in \mathbb{R}^d$
- 对于$[\mathrm{SEP}]$右边的，返回$e_B \in \mathbb{R}^d$



BERT-large有$n_{\text{heads}} = 16$个注意头，并且$d_{\text{model}} = 1024$，总共355M个参数。

8.1.2.2.1 掩码语言模型

掩码语言模型的基本思想是通过加噪然后预测来进行训练：

$$[\text{the}, [\text{MASK}], \text{ate}, [\text{MASK}], \text{cheese}] \Rightarrow [\text{the}, \text{mouse}, \text{ate}, \text{the}, \text{cheese}].$$

更普遍地说，我们可以将其视为类似于去噪自动编码器，其中我们映射有噪声/不完整版本$\tilde{x}_{1:L}$，并尝试重建原始$x_{1:L}$。

$$\tilde{x}_{1:L} \Rightarrow x_{1:L}.$$

建模：我们首先定义模型分布。给定输入$\tilde{x}_{1:L}$及其上下文嵌入，模型独立地预测每个token：

$$p(x_i \mid \tilde{x}_{1:L}) = \text{softmax}(E\phi(\tilde{x}_{1:L})_i).$$

掩码：我们定义了一个（随机）噪声函数$A(\tilde{x}_{1:L} \mid x_{1:L})$：

$$\underbrace{x_{1:L}}_{\text{original}} \overset{A}{\Rightarrow} \underbrace{\tilde{x}_{1:L}}_{\text{noised}}.$$

以下是A的定义：

- 假设$I \subset \{1, \ldots, L\}$代表所有位置中随机的15%。
- 对于每个$i \in I$：
  - 以0.8的概率，$\tilde{x}_i \leftarrow [\text{MASK}]$
  - 以0.1的概率，$\tilde{x}_i \leftarrow x_i$
  - 以0.1的概率，$\tilde{x}_i \leftarrow \text{random word from } \mathcal{V}$

减少分布偏移：如果我们总是使用$[\text{MASK}]$来替换I中选定的token，则：

- 在训练期间，输入到BERT的都是带$[\text{MASK}]$的序列。
- 而在测试时，我们会输入没有$[\text{MASK}]$的句子，这将导致分布发生变化。一种启发式的解决方法是在20%的时间内用真实单词替换。

8.1.2.2.2 下一句预测

回想一下，BERT是在拼接好的成对句子上训练的。下一句预测的目标是预测第二句是否跟随第一句。

$$[[\text{CLS}], \text{the}, \text{mouse}, \text{ate}, \text{the}, \text{cheese}, [\text{SEP}], \text{it}, \text{was}, \text{full}] \Rightarrow 1.$$

$$[[\mathrm{CLS}], \mathrm{the}, \mathrm{mouse}, \mathrm{ate}, \mathrm{the}, \mathrm{cheese}, [\mathrm{SEP}], \mathrm{hello}, \mathrm{world}] \Rightarrow 0.$$

然后使用$[\mathrm{CLS}]$的嵌入来做二分类。

8.1.2.2.3 数据集

$\mathcal{D}$是按如下方式构造的一组样本$(x_{1:L}, c)$：

- 令A是语料库中的一个句子。
- 以0.5的概率，B是下一句话。
- 以0.5的概率，B是语料库中的一个随机句子。
- 令$x_{1:L} = [[\mathrm{CLS}], A, [\mathrm{SEP}], B]$
- 令c表示B是否是下一句。

8.1.2.2.4 训练目标

BERT的训练目标是：

$$\mathcal{O}(\theta) = \sum_{(x_{1:L},c)\in\mathcal{D}} \underbrace{\mathbb{E}_{I,\tilde{x}_{1:L}\sim A(\cdot|x_{1:L},I)}[\sum_{i\in I} -\log p_\theta(\tilde{x}_i \mid x_{1:L})]}_{\text{masked language modeling}} + \underbrace{-\log p(c \mid \phi(x_{1:L})_1)}_{\text{next sentence prediction}}.$$

稍后我们将讨论训练，这里简要总结一下BERT：

- BERT（以及ELMo和ULMFiT）表明，一个统一的体系结构（Transformer）可以用于多个分类任务。
- BERT真正将NLP社区转变为预培训+微调的范式。
- BERT显示了深度双向上下文嵌入的重要性，尽管通过模型大小和微调策略可能会弥补这一点（p-tuning）。

8.1.2.3 RoBERTa

RoBERTa对BERT进行了以下改进：

- 删除了下一句预测这一目标函数（发现它没有帮助）。
- 使用更多数据训练（16GB文本 $\Rightarrow$ 160GB文本）。
- 训练时间更长。
- RoBERTa在各种基准上显著提高了BERT的准确性（例如，在SQuAD上由81.8到89.4）。

8.1.3 Encoder-decoder 模型

任务示例（表格生成文本）：

$$[\text{name}, :, \text{Clowns}, |, \text{eatType}, :, \text{coffee}, \text{shop}] \mathbb{R} ightarrow [\text{Clowns}, \text{is}, \text{a}, \text{coffee}, \text{shop}].$$

回想一下编码器-解码器模型（例如，BART、T5）：

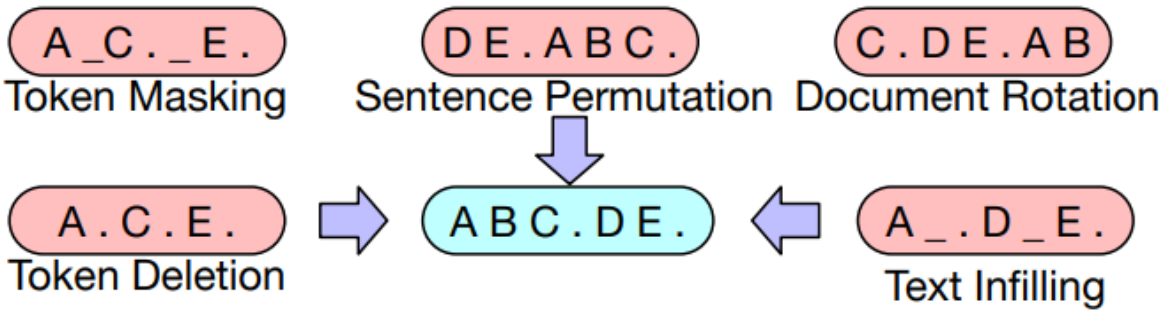
- 首先像BERT一样对输入进行双向编码。
- 然后像GPT-2一样对输出进行自回归解码。

8.1.3.1 BART (Bidirectional Auto-Regressive Transformers)

BART (Lewis et al. 2019)是基于Transformer的编码器-解码器模型。

- 使用与RoBERTa相同的编码器架构（12层，隐藏维度1024）。
- 使用与RoBERTa相同的数据进行训练（160GB文本）。

BART使用了以下变换$A(\tilde{x}_{1:L} \mid x_{1:L})$：



基于BERT的实验，最终模型进行以下了变换：

- 掩码文档中30%的token
- 将所有子句打乱

最后，通过微调，BART在分类和生成任务上都展示了强大的效果。

8.1.3.2 T5 (Text-to-Text Transfer Transformer)

T5 (Raffel et al., 2020)是另一种基于Transformer的编码器-解码器模型。

预训练任务：
给定一段文本，在随机位置将其分割为输入和输出：

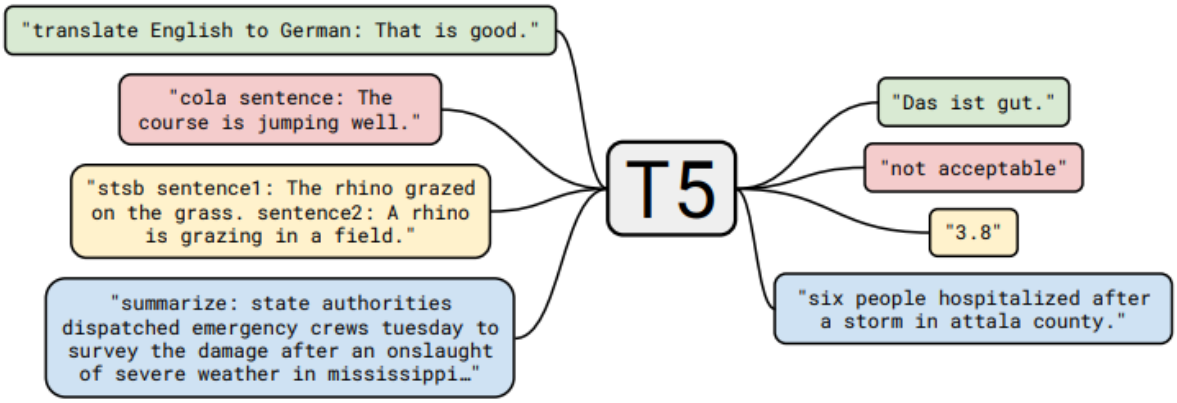
$$[\text{the}, \text{mouse}] \Rightarrow [\text{ate}, \text{the}, \text{cheese}].$$

论文尝试了许多不同的无监督目标：

Objective	Inputs	Targets
Prefix language modeling	Thank you for inviting	me to your party last week .
BERT-style Devlin et al. (2018)	Thank you <M> <M> me to your party apple week .	*(original text)*
Deshuffling	party me for your to . last fun you inviting week Thank	*(original text)*
MASS-style Song et al. (2019)	Thank you <M> <M> me to your party <M> week .	*(original text)*
I.i.d. noise, replace spans	Thank you <X> me to your party <Y> week .	<X> for inviting <Y> last <Z>
I.i.d. noise, drop tokens	Thank you me to your party week .	for inviting last
Random spans	Thank you <X> to <Y> week .	<X> for inviting me <Y> your party last <Z>

并发现“i.i.d. noise, replace spans”效果最好（尽管许多目标相似）。

论文还将所有经典的NLP任务放在一个统一的框架中，称为“Text-to-Text”任务：



以分类任务任务为例，不同模型的差异如下：

- BERT使用$[\mathrm{CLS}]$的嵌入来预测。
- T5、GPT-2、GPT-3等（生成模型）将分类任务转换成自然语言生成。

注意：

- 论文对整个pipline的许多方面（数据集、模型大小、训练目标等）进行了深入研究。
- 基于这些见解，他们训练了一个11B的模型。

4.2 优化算法

现在，我们将注意力转向如何优化目标函数。

为了简单起见，让我们以自回归语言模型为例：

$$O(\theta) = \sum_{x \in D} -\log p_\theta(x).$$

4.2.1 随机梯度下降（SGD）

最简单的优化算法是用小批量进行随机梯度下降，该算法的步骤如下：

- 初始化参数θ_0
- 重复以下步骤：
  - 采样小批量$B_t \subset D$
  - 根据梯度更新参数：

$$\theta_t \leftarrow \theta_{t-1} - \eta \frac{1}{|B_t|} \sum_{x \in B_t} \nabla_\theta (-\log p_\theta(x)).$$

优化的关键点包括：

1. 我们希望参数θ可以快速收敛
2. 我们希望优化在数值上是稳定的
3. 我们希望内存高效（尤其是对于大模型）

这些点往往相互矛盾（例如，通过低精度训练，可以实现快速收敛、减少内存占用，但是会导致训练不稳定）

因此，我们可以从几个层次来进行优化：

1. 针对经典优化：二阶方法、约束优化等。
2. 针对机器学习：随机方法、隐式正则化+早停法
3. 针对深度学习：初始化、归一化（更改模型架构）
4. 针对大语言模型：由于稳定性问题，学习率和一些直觉（例如，二阶方法）仍然有用，但要使大语言模型有效训练，还需要克服许多其他独特的挑战。不幸的是，其中大部分内容都是特别的，人们对此了解甚少。

4.2.2 Adam (adaptive moment estimation)

Adam算法拥有以下两个创新：

1. 引入动量（继续朝同一方向移动）。
2. 参数θ_0的每个维度都有一个自适应（不同）的步长（受二阶方法启发）。

它的步骤如下：

- 初始化参数θ_0
- 初始化动量$m_0, v_0 \leftarrow 0$
- 重复以下步骤：
    - 采样小批量$B_t \subset D$
    - 按照如下步骤更新参数：
        - 计算梯度

$$g_t \leftarrow \frac{1}{|B_t|} \sum_{x \in B_t} \nabla_\theta (-\log p_\theta(x)).$$

        - 更新一阶、二阶动量

$$m_t \leftarrow \beta_1 m_{t-1} + (1-\beta_1) g_t$$
$$v_t \leftarrow \beta_2 v_{t-1} + (1-\beta_2) g_t^2$$

- 对偏差进行修正

$$\hat{m}_t \leftarrow m_t / (1-\beta_1^t)$$
$$\hat{v}_t \leftarrow v_t / (1-\beta_2^t)$$

- 更新参数

$$\theta_t \leftarrow \theta_{t-1} - \eta \hat{m}_t / (\sqrt{\hat{v}_t} + \epsilon).$$

存储占用分析：

Adam将存储从2倍的模型参数（θ_t, g_t）增加到了4倍（θ_t, g_t, m_t, v_t）。

4.2.3 AdaFactor

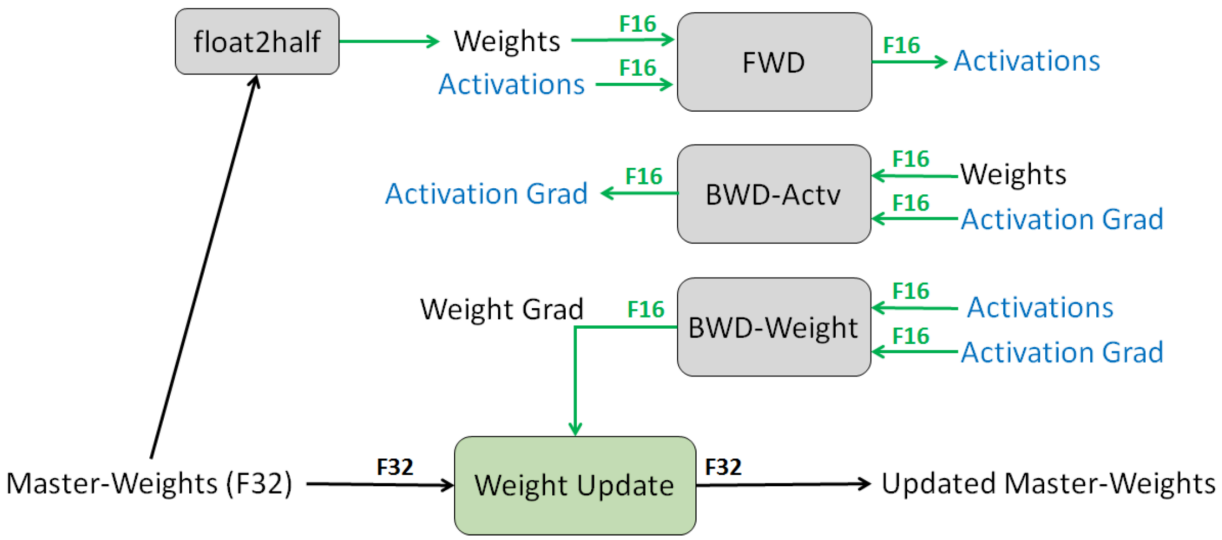
AdaFactor是一种为减少存储占用的优化算法。它有如下特点：

- 它不储存m_t, v_t这样的$O(m \times n)$矩阵，而是存储行和列的和$O(m+n)$并重构矩阵
- 去除动量
- 它被用来训练T5
- AdaFactor可能使训练变得困难（见Twitter thread和blog post）

4.2.4 混合精度训练

混合精度训练是另一种减少存储的方法

- 通常来说，默认的精度是：FP32（32位浮点）
- 其他可选精度：FP16（16位浮点），但问题是任何小于2^{-24}的值都会变为0。
- 解决方案：将主权重存储在FP32中，并在FP16中执行其他所有操作。
- 损失缩放：按比例放大损失，以避免梯度数值太小。
- 结果：存储减少了一半。



4.2.5 学习率

- 通常情况下，学习率会随着时间的推移而衰减。
- 对于Transformer模型，我们实际上需要通过预热（warmup）提高学习率。
- Huang et al., 2020表明，一个潜在的原因是防止层归一化的梯度消失，导致使用Adam优化器训练时不稳定。

4.2.6 初始化

- 给定矩阵$W \in \mathbb{R}^{m \times n}$，标准初始化（即，xavier初始化）为$W_{ij} \sim N(0, 1/n)$。
- GPT-2和GPT-3通过额外的$1/\sqrt{N}$缩放权重，其中N是残差层的数量。
- T5将注意力矩阵增加一个$1/\sqrt{d}$（代码）。

以GPT-3为例，使用的参数如下：

- Adam参数：$\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.95, \epsilon = 10^{-8}$
- 批量小：320万个token（约1500个序列）
- 使用梯度剪裁（$g_t \leftarrow g_t / \min(1, \|g\|_2)$）
- 线性学习率预热（前3.75亿个token）
- 余弦学习率衰减到10%
- 逐渐增加批大小
- 权重衰减设为0.1

延伸阅读

- 混合精度训练
- Fixing Weight Decay Regularization in Adam. I. Loshchilov, F. Hutter. 2017. 介绍了AdamW
- ELECTRA: Pre-training Text Encoders as Discriminators Rather Than Generators. Kevin Clark, Minh-Thang Luong, Quoc V. Le, Christopher D. Manning. ICLR 2020.
- DeBERTa: Decoding-enhanced BERT with Disentangled Attention. Pengcheng He, Xiaodong Liu, Jianfeng Gao, Weizhu Chen. ICLR 2020.