HPC TOOLS AI: BASELINE

Unai Iborra Albeniz, Gonzalo Silvalde Blanco

iborra.unai@gmail.com, gonzalo.silvalde@udc.es

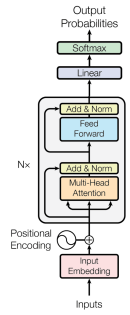
Resumen

En esta primera práctica de **HPC TOOLS AI**, hemos trabajado sobre **BERT-Base Model**, un modelo desarrollado por Google. Es un *transformer encoder* preentrenado que produce representaciones contextuales de palabras teniendo en cuenta tanto el contexto a la izquierda como a la derecha, por lo tanto, es considerado bidireccional. Para el entrenamiento se ha utilizado como conjunto de datos para el entrenamiento **SQUAD dataset**, un dataset utilizado tradicionalmente para comprensión lectora. Se han utilizado los métodos proporcionados por pytorch para profiling. Gracias a ello se ha logrado observar los tiempos y recursos tomados por los entrenamientos. Adicionalmente, se ha implementado la visualización de métricas del entrenamiento mediante tensorboard.

1. BERT

BERT (*Bidirectional Encoder Representations from Transformers*) es un transformador bidireccional preentrenado en texto sin etiquetar para predecir tokens enmascarados en una oración y predecir si una oración sigue a otra [1]. La idea principal es que, al enmascarar aleatoriamente algunos tokens, el modelo puede entrenarse en el texto a la izquierda y a la derecha, lo que le proporciona una comprensión más profunda. BERT también es muy versátil porque sus representaciones lingüísticas aprendidas pueden adaptarse a otras tareas de NLP (*Natural Language Processing*) mediante el ajuste de una capa o cabeza adicional.

La arquitectura típica del modelo base de **BERT** consta de 12 bloques de *encoders*, 768 unidades de tamaño oculto y 12 cabezas de atención, totalizando aproximadamente 110 millones de parámetros.



	BERT Base	BERT Large
Number of embedding dimensions, d_model	768	1024
Number of encoder blocks, N:	12	24
Number of attention heads per encoder block:	12	16
Size of hidden layer in feedforward network:	3072	4096
Total parameters:	110 million	340 million

Figura 1: Arquitectura del modelo BERT

El preentrenamiento de BERT se realiza mediante dos tareas principales: **MLM**(*Masked Language Modeling*), donde se enmascara aleatoriamente el 15 % de los tokens de entrada y el modelo debe predecirlos; y NSP (*Next Sentence Prediction*), donde el modelo aprende a determinar si dos oraciones son consecutivas en el texto original [2]. Este enfoque de preentrenamiento permite que **BERT** capture relaciones contextuales bidireccionales profundas, superando a modelos anteriores como ELMo o GPT en numerosas tareas de comprensión del lenguaje natural.

En nuestro caso concreto, hemos utilizado **BertForQuestionAnswering** de la librería **transformers** de Hugging Face [3]. Esta clase especializada extiende el modelo BERT base añadiendo una capa de clasificación lineal sobre la última capa oculta del codificador, diseñada específicamente para predecir las posiciones de inicio y fin de la respuesta dentro del contexto proporcionado.

La arquitectura de **BertForQuestionAnswering** genera dos conjuntos de logits: uno para identificar el token de inicio de la respuesta y otro para el token final [4]. Durante el entrenamiento, cuando se proporcionan las etiquetas `start_positions` y `end_positions`, el modelo calcula automáticamente la función de pérdida como la suma de dos pérdidas de entropía cruzada (una para cada predicción). Esta automatización simplifica significativamente el proceso de entrenamiento, ya que no es necesario implementar manualmente el cálculo de la pérdida ni la lógica de backpropagation específica para esta tarea.

Además, hemos configurado el modelo con el optimizador **AdamW** con una tasa de aprendizaje de `3e-5` y un scheduler lineal con warmup, siguiendo las recomendaciones estándar para el fine-tuning de modelos BERT [5]. El entrenamiento se ha realizado con un tamaño de batch de 8 ejemplos durante 10 épocas, utilizando el subconjunto de entrenamiento de SQuAD previamente preprocesado.

1.1. Tokenización: BertTokenizerFast

Para la tokenización de los datos, hemos empleado BertTokenizerFast, el tokenizador recomendado para BertForQuestionAnswering.

En nuestra implementación, hemos configurado una

longitud máxima de 384 tokens (`max_length=384`)[6], un valor estándar para tareas de Question Answering que equilibra la capacidad de procesar contextos extensos con las limitaciones de memoria.

Además en nuestra configuración usamos `stride=128` con `return_overflowing_tokens=True`.

1.2. Dataset: SQuAD

SQuAD (*Stanford Question Answering Dataset*) es uno de los conjuntos de datos más utilizados para entrenar y evaluar modelos de comprensión lectora y respuesta a preguntas [7]. La versión que hemos utilizado, SQuAD v1.1, contiene más de 100.000 pares de pregunta-respuesta basados en artículos de Wikipedia, donde cada respuesta es un segmento de texto extraído directamente del contexto proporcionado.

La estructura de SQuAD es especialmente adecuada para tareas de *extractive question answering*, donde el objetivo es identificar el inicio y el final exactos de la respuesta dentro del contexto. En nuestra implementación, hemos trabajado con un subconjunto de 10.000 ejemplos del conjunto de entrenamiento (`subset_size=10000`) para reducir el tiempo de entrenamiento. El preprocesamiento de estos datos incluye la tokenización conjunta de preguntas y contextos, el cálculo de las posiciones de inicio y fin de las respuestas en términos de tokens, y el manejo de casos donde la respuesta no puede ser localizada en el segmento tokenizado debido al truncamiento.

2. Profiling y visualización de métricas con TensorBoard

Para realizar el profiling del entrenamiento se ha utilizado la clase `torch.profiler.profile()`. Èsta permite analizar con detalle las llamadas a función y etapas del modelo, uso de CPU, GPU, memoria, etc.

Se han definido los siguientes tres parámetros para facilitar la configuración del profiling en el método `train()`:

1. `profiler=None`,
2. `save_profiler_time_table: bool = False`,
3. `save_tensorboard_metrics: bool = False`,

El parámetro `profiler` permite definir el profiler deseado para el entrenamiento segùn se defina la clase `torch.profiler.profile()`. El parámetro `save_profiler_time_table` permite al entrenamiento guardar en formato tabla los resultados del profiling, ordenados según el tiempo tardado en ejecutar CUDA por cada parte de la ejecución del entrenamiento.

El parámetro `save_tensorboard_metrics` permite guardar para una futura visualización con TensorBoard:

1. Los “losses”, “step times” y “learning rates” de cada step en formato escalar.
2. El tiempo total, pérdida final, `batch size` y número de épocas.

Para ejecutar fácilmente el servidor de TensorBoard se ha creado el script `/scripts/start_profiling_srv.sh` (se ha configurado para visualizar los resultados de todos los entrenamientos realizados).

Se ha preparado el código para correr con la siguiente configuración de profiling:

La configuración establecida utiliza un profiler que sigue el siguiente `schedule`: `schedule(wait=2, warmup=100, active=8, repeat=1)`. Esto indica al profiler que omita los primeros 2 steps, que haga profiling de los siguientes 100 pero no utilice ni guarde sus resultados (inicializar el profiler causa una bajada de rendimiento significativa según la documentación por lo que se recomienda utilizar `warmup` en el profiler para resultados más fiables). Finalmente se realiza el profiling de los 8 siguientes steps. Esta configuración guarda tanto los resultados del profiling en formato tabla, como en JSON para visualización mediante Perfetto.

La decisión de realizar profiling en ̆00fanicamente 8 steps ha sido tomada debido a que en pruebas de profiling de todo el entrenamiento, el entrenamiento finalizaba por falta de memoria a la hora de guardar los datos, y en los casos de entrenamientos con menos `epochs`, el entrenamiento sí acababa pero los resultados del profiling ocupaban decenas de gigabytes. Aunque el profiling no se realiza a lo largo de todo el entrenamiento, los resultados obtenidos son representativos y permiten identificar las secciones más costosas en tiempo y recursos. Además, debido a este `schedule`, los resultados de tiempo total de la tabla de métricas de profiling no coincidirán con los resultados de entrenamiento real (el resultado de la tabla es el tiempo total de entrenamiento con profiling aplicado).

Se ha explorado la opción de visualizar los resultados del profiling mediante TensorBoard pero no se ha podido realizar dado que esta funcionalidad ha sido deprecada según la documentación de PyTorch [8]. La documentación indica que se debe utilizar Perfetto para la visualización del profiling.

3. Resultados de los entrenamientos

El modelo ha sido entrenado en diferentes hardwares con la finalidad de observar las diferencias de tiempo y recursos entre ellos:

1. Nvidia A100 GPU
2. Nvidia Tesla T4 GPU
3. Nvidia RTX5070 GPU
4. Intel Xeon Ice Lake 8352Y CPU (con 64 hilos)

Los resultados de dichos entrenamientos han sido los siguientes para un entrenamiento de 5 epochs (1268 steps por epoch, 6340 steps totales):

Nvidia A100 GPU

Tiempo total (5 epochs): 826 s (˜14 minutos)
Loss final: 0.13723315061081043

Nvidia Tesla T4 GPU

Tiempo total (5 epochs): 3520 s (~59 minutos)
Loss final: 0.12958095948443576

Nvidia RTX5070 GPU

Tiempo total (5 epochs): 812 s (~14 minutos)
Loss final: 0.14979120969766097

Intel Xeon Ice Lake 8352Y CPU (con 64 hilos)

Tiempo total (5 epochs): 18742 s (~312 minutos)
Loss final:

Se puede observar un gran cambio de rendimiento entre ejecución en GPU frente a ejecución en CPU, como es de esperar. Respecto a las diferencias entre las ejecuciones de GPU, se puede observar un rendimiento notablemente superior en la A100 y RTX5070 frente a la Tesla T4. Este rendimiento es coherente considerando la capacidad de procesamiento y núcleos CUDA de cada GPU.

Se concluye que el *speedup* con las gráficas A100 y RTX5070 es de aproximadamente 23 frente a la ejecución en CPU y de aproximadamente 4 frente a la Tesla T4.

4. Perfetto

Respecto al profiling de los entrenamientos, se han visualizado los resultados del profiling mediante la interfaz web de Perfetto. En la figura 2 se puede observar la vista global de las distintas etapas del entrenamiento en un dashboard global (A100):

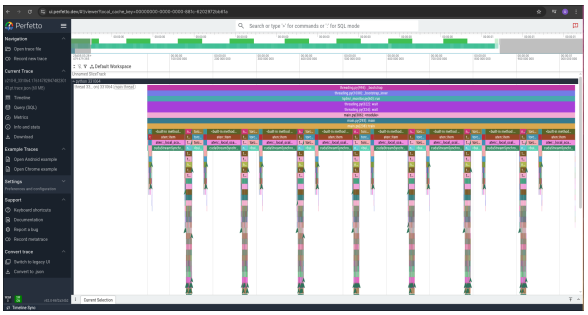


Figura 2: Visión global con Perfetto (A100)

En la figura 3 se puede observar la misma vista global de la figura anterior pero enfocando el área de visualización en un rango de steps menor para observar con más detalle las distintas llamadas a funciones del modelo:

En la figura 4 se puede observar una tabla de tiempos y más datos de cada llamada a función del profiling:

5. Tablas de profiling

Puesto que no se ha podido visualizar el profiling en TensorBoard por estar deprecado en PyTorch, se ha optado por guardar una tabla en formato texto de las filas más costosas en tiempo de CUDA. En la tabla se incluyen los siguientes campos:

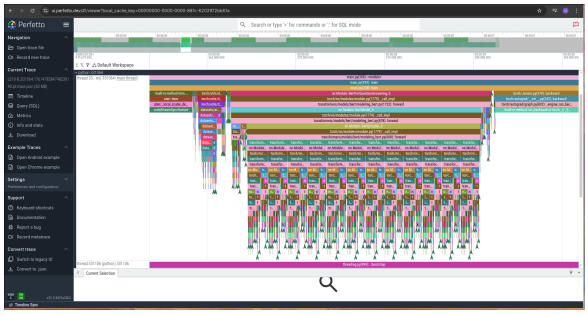


Figura 3: Visión zoom con Perfetto (A100)

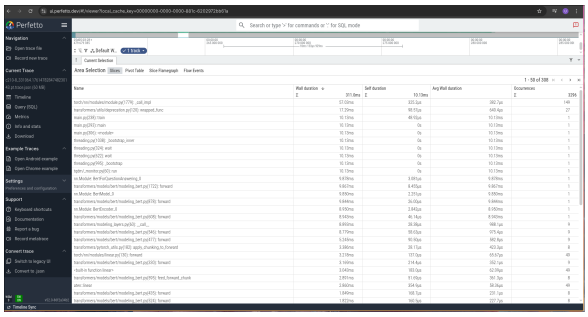


Figura 4: Visión tabla Perfetto (A100)

- Name
- Self CPU %
- Self CPU
- CPU total %
- CPU total
- CPU time avg
- Self CUDA
- Self CUDA %
- CUDA total
- CUDA time avg
- CPU Mem
- Self CPU Mem
- CUDA Mem
- Self CUDA Mem
- N of Calls

Los resultados de los entrenamientos de cada GPU en este formato tabla se pueden observar en la carpeta `/results/{hardware}/profile/profiler_summary.txt`.

6. Visualización de métricas escalares mediante TensorBoard

Se muestran a continuación las imágenes de las métricas escalares guardadas para visualizar con TensorBoard:

Además se han guardado datos sobre el tiempo total de ejecución, epochs, loss final y `batch size` visualizables mediante TensorBoard:

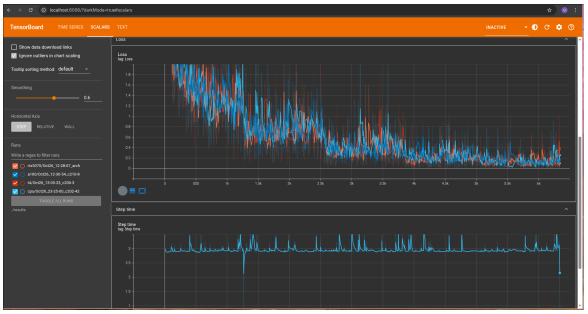


Figura 5: Visualización por TensorBoard

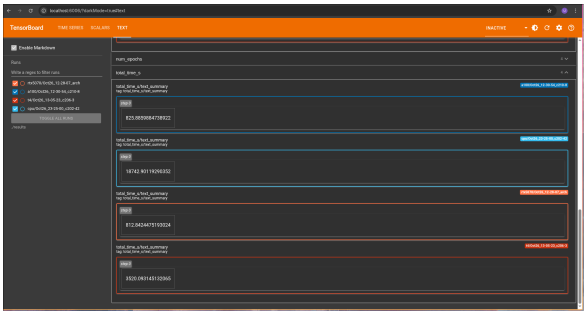


Figura 6: Visualización de tiempos en TensorBoard

Referencias

[1] Hugging Face. *BERT - Hugging Face Documentation*. `https://huggingface.co/docs/transformers/model_doc/bert`

[2] Hugging Face. *BERT base model* . `https://huggingface.co/google-bert/bert-base-uncased`

[3] Hugging Face. *Transformers Library*. `https://huggingface.co/docs/transformers/v4.57.1/en/model_doc/bert#transformers.BertForQuestionAnswering`

[4] Hugging Face. *Question Answering - Task Guide*. `https://huggingface.co/docs/transformers/tasks/question_answering`

[5] Hugging Face. *Fine-tuning a pretrained model*. `https://huggingface.co/docs/transformers/optimizers`

[6] Hugging Face Discuss. *Why max_length = 384 by default and not 512?*. `https://discuss.huggingface.co/t/squad-bert-why-max-length-384-by-default-and-not-512/11693`

[7] Hugging Face. *SQuAD Dataset Card*. `https://huggingface.co/datasets/squad`

[8] Pytorch *Pytorch Documentation*. `https://docs.pytorch.org/tutorials/intermediate/tensorboard_profiler_tutorial.html`