Introduction to PLM

Introduction to PLM

PLM: Pre-trained Language Model

- Transformer Layer 结构
- Self-Attention 过程
- PLM 的结构和预训练目标

Think Language Modeling as Representation Learning

- 表征学习是深度学习的主要方法，深度神经网络的自动特征提取器以表征向量的形式建模样本特征，以用于实际任务
- 自 Bengio et al. (2003) 将前馈神经网络引入自然语言处理以来，表征学习就是语言建模的主要方法

对于长度为 L 的自然语言语句 $\mathrm{s} = \{x_1, x_2, \ldots, x_L\}$，其中 x_i 是自然语言 token，表征计算即如下的过程：

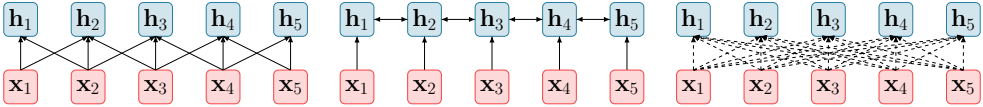
$$[\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \ldots, \mathbf{h}_L] = \mathrm{Encoder}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_L)$$

其中 $\mathbf{x}_i$ 是 token x_i 的嵌入向量，$\mathbf{h}_i$ 是 x_i 的表征，Encoder 是一个神经网络编码器。

Neural Encoder

神经语言 (序列) 编码器根据每层中的基本编码单元可以分为三种：

- Convolutional Language Encoder
- Recurrent Language Encoder
- Self-Attention Language Encoder: 可以简述为：在进行序列表征学习 (序列建模) 时，让模型自动选择基于该序列 (Self) 的哪些部分进行计算，即：$\mathbf{h}_i = \sum_{j=1}^{L} \alpha_{ij}\mathbf{x}_j$, α_{ij} 即注意力参数



(a) CNN Encoder (b) RNN Encoder (c) Self-Attn Encoder

一种 Self-Attn Encoder: Transformer Layer

Vaswani et al. (2017) 在 “Attention Is All You Need” 中提出了一种完全基于注意机制的语言模型，并在机器翻译，语法解析等任务上达到了 sota.

其模型的重要结构：Transformer Layer 成为后续深度语言模型的基础

Transformer Layer 包括两个子层：

- Self-Attention sub-layer
- Feed-Forward sub-layer

每个子层还使用了 Residual Connection (K. He et al. 2016) 和 Layer Normalization (Ba, Kiros, and Hinton 2016).

下面分别介绍这些结构

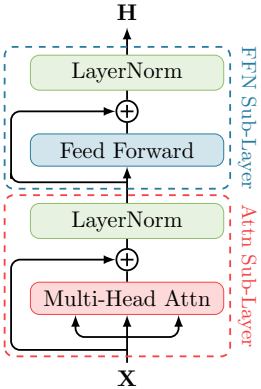


图: Transformer Layer

Attention sub-layer

Attention sub-layer 是模型的核心，即：如何计算注意力分数 (α_{ij}).
Transformer 使用 Query-Key-Valye(QKV) 模型实现这部分计算
下面以如下的顺序介绍 transformer 中的 QKV 计算过程：

- 首先介绍 Scaled dot-product attention 的计算过程 (基本的 QKV 计算过程)
- 然后介绍其计算形式上的合理性
- 最后介绍 transformer 的 attention sublayer 中使用的 multi-head attention 的计算过程 (Transformer 使用的一个 trick)

Scaled dot-product attention

- 首先计算 $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}$：

$$\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{W}^Q, \mathbf{X}\mathbf{W}^K, \mathbf{X}\mathbf{W}^V$$

  其中 $\mathbf{X} = \text{concat}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_L)$ 是输入文本嵌入向量的拼接，$\mathbf{W}^Q, \mathbf{W}^K, \mathbf{W}^V$ 是投影矩阵，也是模型参数

- 然后通过以下过程计算表征：

$$\mathbf{H} = \text{Attn}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{softmax}(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top}{\sqrt{d_k}})\mathbf{V}$$

  其中 d_k 是模型维度，$\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{L \times d_k}$ 是输出表征的拼接矩阵，即：
  $\mathbf{h}_i = \mathbf{H}[i, :], \forall i \in [1, L]$

为什么有效? I

明确两个观点:

- self-attention 过程 $\mathbf{h}_i = \sum_{j=1}^{L} \alpha_{ij}\mathbf{x}_j$ 即对输入序列某些部分的选择，自然的，QKV 计算也是在模拟该过程
- 向量内积相当于相似度计算

然后考虑 self-attention 计算的一个简化版:

$$\mathrm{Attn}(\mathbf{X}) = \mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)\mathbf{X}$$

其中 $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1; \mathbf{x}_2; \ldots; \mathbf{x}_L]$, $\mathbf{x}_i$ 是 d_k 维行向量，代表 token i 的嵌入向量。

为什么有效? II —- $\mathrm{Attn}(\mathbf{X}) = \mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)\mathbf{X}$

分析其行为:

-

$$
\begin{aligned}
\mathbf{X}\mathbf{X}^\top &= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_L \end{bmatrix} \cdot [\mathbf{x}_1^\top, \mathbf{x}_2^\top, \cdots, \mathbf{x}_L^\top] \\
&= \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1\mathbf{x}_1^\top & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2^\top & \cdots & \mathbf{x}_1\mathbf{x}_L^\top \\ \mathbf{x}_2\mathbf{x}_1^\top & \mathbf{x}_2\mathbf{x}_2^\top & \cdots & \mathbf{x}_2\mathbf{x}_L^\top \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{x}_L\mathbf{x}_1^\top & \mathbf{x}_L\mathbf{x}_2^\top & \cdots & \mathbf{x}_L\mathbf{x}_L^\top \end{bmatrix} \\
&\in \mathbb{R}^{L\times L}
\end{aligned}
$$

显然, $\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j^\top$ 的结果表征的是向量 $\mathbf{x}_i$ 和 $\mathbf{x}_j$ 之间的相似度。

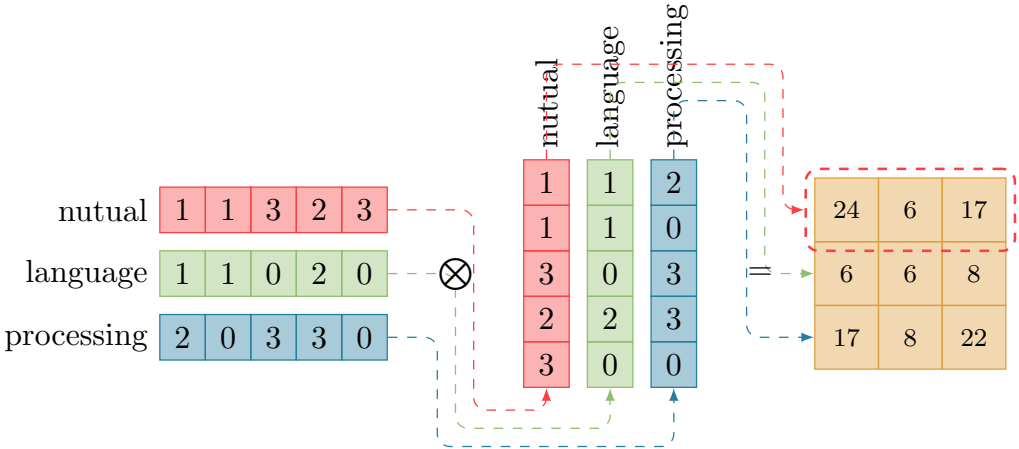
于是 $(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)_{ij}$ 具备了 α_{ij} 的作用：描述了第 i,j 个 token 之间的关系

为什么有效? III —- $\mathrm{Attn}(\mathbf{X}) = \mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)\mathbf{X}$

- Softmax 函数可以简单理解为一种归一化手段，它将上述向量内积的结果归一化到 $(0, 1)$ 的范围内，且同一行中所有值的和为 1. 这样，上述过程中 $\mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)$ 的结果可以认为是一个归一化的加权矩阵
- 最后一步的意义是显然的：根据前面计算的加权矩阵为输入序列的嵌入计算加权和，作为输出表征, 即 $\mathbf{h}_i = \sum_{j=1}^{L} \alpha_{ij}\mathbf{x}_j$ 的过程.

下面是这个过程的一个图示

为什么有效? IV —- $\mathrm{Attn}(\mathbf{X}) = \mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)\mathbf{X}$



为什么有效? V —- $\mathrm{Attn}(\mathbf{X}) = \mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)\mathbf{X}$

$$\mathrm{softmax}\left(\begin{array}{|c|c|c|}\hline 24 & 6 & 17 \\ \hline 6 & 6 & 8 \\ \hline 17 & 8 & 22 \\ \hline\end{array}\right) = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1 & 0 & 0 \\ \hline 0.1 & 0.1 & 0.8 \\ \hline 0.1 & 0 & 0.9 \\ \hline\end{array}$$

[0] $\mathrm{softmax}(\mathbf{x}) = \frac{\exp(\mathbf{x})}{\sum \exp(\mathbf{x})}$

为什么有效? VI —- $\mathrm{Attn}(\mathbf{X}) = \mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)\mathbf{X}$

attn scores for "natual"

1	0	0
0.1	0.1	0.8
0.1	0	0.9

$\otimes$

1	1	3	2	3
1	1	0	2	0
2	0	3	3	0

$=$

representation for "natual"

1	1	3	2	3
1.8	0.2	2.7	2.8	0.3
1.9	0.1	3	2.9	0.3

为什么有效? VII —- 回到 QKV

与 QKV 的计算过程相比，上面讨论的简化版本主要有以下区别：

- 文本序列的输入嵌入首先经过线性投影才参与计算，而不是直接计算
- 注意力分数在归一化之前要先经过一个缩放系数 $\sqrt{d_k}$

$$\begin{cases} \mathrm{softmax}(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top}{\sqrt{d_k}})\mathbf{V}, where: \mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V} = \mathbf{X}\mathbf{W}^Q, \mathbf{X}\mathbf{W}^K, \mathbf{X}\mathbf{W}^V \\ \mathrm{softmax}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)\mathbf{X} \end{cases}$$

下面解释其原因

为什么有效? VIII

- $\mathbf{W}^Q, \mathbf{W}^K, \mathbf{W}^V$ 三个矩阵都是与输入相乘而起作用，其本质是对输入表征进行线性变换，主要的信息仍然是 $\mathbf{X}$，其意义在于:
  - 提升模型的拟合能力。三个线性变换相当于线性层，属于神经网络的一种
  - 如果不使用这三个线性变换，$\mathbf{X}\mathbf{X}^\top$ 的结果中，$\mathbf{X}\mathbf{X}^\top_{ii}$ 的值，即每个 token 对自己的注意力将会大大超过对其他 token 的注意力，经过 softmax 之后其他 token 的 attention score 会被严重挤压
- 缩放系数 $\sqrt{d_k}$ 对矩阵的内积进行缩放:
  - 如果不进行缩放，在 d_k 即向量维度很大时向量之间的内积也会很大，这样经过 softmax 之后的梯度会非常小[1]

如上就是 self-attention 中 scaled dot-product attention 的主要内容，实际上 transformer 模型中使用的是它的简单复合：Multi-Head Attention

[1] 例如对于均值为 0, 方差为 1 的 d_k 维向量 $\mathbf{q}, \mathbf{k}$, 他们内积结果 $\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}^\top$ 的均值为 0, 方差为 d_k. 当 d_k 很大时, 意味着分布 $\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}^\top$ 的值集中在绝对值大的区域, 即 $\mathrm{softmax}(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}^\top)$ 的大部分值之间的梯度很小。因此需要以 $\sqrt{k}$ 进行缩放，使内积结果的方差为 1

Multi-Head Attention

Multi-Head Attention 具体地说，就是将 $\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}$ 三个矩阵进一步投影到 h 个子空间, 然后进行 self-attention 计算:

$$\text{head}_i = \text{Attn}(\mathbf{Q}\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{K}\mathbf{W}_i^K, \mathbf{V}\mathbf{W}_i^V)$$

其中 $i \in [1, h]$, $\mathbf{W}_i^Q, \mathbf{W}_i^K \in \mathbb{R}^{d_{\text{model}} \times d_k}$, $\mathbf{W}_i^V \in \mathbb{R}^{d_{\text{model}} \times d_v}$
d_k, d_v 是一个比 d_{model} 小的值，在 “Attention Is All You Need” 中, 作者取
$h = 8, d_k = d_v = d_{\text{model}}/h$

Multi-Head Attention

在 h 个子空间进行 self-attention 计算将对每个词获得 h 个 d_v 维度的表征，Multi-Head Attention 将它们拼接起来并投影回 d_{model} 维度。

$$\text{MultiHead}(\mathbf{Q}, \mathbf{K}, \mathbf{V}) = \text{concat}(\text{head}_1, \ldots, \text{head}_h)\mathbf{W}_O$$

其中 $\mathbf{W}_O \in \mathbb{R}^{hd_v \times d_{\text{model}}}$ 是投影矩阵

Multi-Head Attention

关于为什么要做 Multi-Head Attention, Vaswani et al. 称：
在 Scaled dot-product attention 中，输入表征直接被投影到 d_k 维度的 Query, Key, Value 向量，然后进行 self-attention 的加权平均过程。这个过程抑制了模型从**多个方面**提取文本序列的特征

实际上作者的代码里是将 d_k 维度的 Query, Key, Value 切分成 h 份，分别执行 self-attention 计算后拼接并投影

猜测这只是实践中发现效果更好的一个 trick

至此就是 Transformer 模型中关于 self-attention sublayer 的全部内容[2]

[2] BERT 中推荐阅读的 transformer 模型解释: http://nlp.seas.harvard.edu/2018/04/03/attention.html

Feed-Forward Layer

Feed-Forward sublayer 是一个全连接层，由两个线性层和 ReLU 激活函数组成，它对所有 token 的表征分别进行同等的变换:

$$\mathrm{FFN}(\mathbf{x}) = \mathrm{ReLU}(\mathbf{x}\mathbf{W}_1 + \mathbf{b}_1)\mathbf{W}_2 + \mathbf{b}_2$$

虽然 self-attention 是 transformer 成功的关键，但是 FFN 层的参数量实际上是 self-attention 层的两倍，以 Transformer 模型为例，Vaswani et al. 使用的参数是 $d_{\text{model}} = 512$, 而 FFN 层的隐藏层维度是 $d_{ff} = 2048$。
一些工作认为预训练的 transformer 模型中 FFN 层存储着与下游任务相关的信息，而 self-attention 层中存储的则是文本之间如何进行有效交互的模式 (Geva et al. 2021; J. He et al. 2022).

Residual Connection and Layer Normalization

Residual Connection (K. He et al. 2016) 和 Layer Normalization (Ba, Kiros, and Hinton 2016) 都是为解决深度模型训练困难的实践性问题提出的，并无理论解释。

- 对于 Residual Connection，自提出 (“Deep Residual Learning for Image Recognition”) 以来，就一直是深度模型必备的部分，它主要解决了在过深的模型中训练时梯度 (信息) 消失的问题。
- 对于 Layer Normalization，它是针对 Batch Normalization (Ioffe and Szegedy 2015) 难以应用在 RNN 中的问题提出的。Normalization 操作简而言之就是将神经网络中每层的输出 (神经元激活分数) 的分布恢复为均值为 0, 方差为 1 的正态分布，解决 Interval Covariate Shift 问题。

总结 Self-Attention Layer

- 总的计算过程为：

$$\mathbf{H}_{\text{attn}} = \text{LayerNorm}(\text{MultiHead}(\mathbf{X}) + \mathbf{X})$$
$$\mathbf{H}_{\text{ffn}} = \text{LayerNorm}(\text{FFN}(\mathbf{H}_{\text{attn}}) + \mathbf{H}_{\text{attn}})$$

  $\mathbf{H}_{\text{ffn}}$ 即最终的输出表征。

- Why Self-Attention?
  可以从以下三个方面考虑 self-attention 替代 CNN 和 RNN 的益处 (Vaswani et al. 2017)：

LayerType	每层的计算复杂度	需要串行计算的操作	最大路径长度
Self-Attention	$O(n^2 \cdot d)$	$O(1)$	$O(1)$
RNN	$O(n \cdot d^2)$	$O(n)$	$O(n)$
CNN	$O(k \cdot n \cdot d^2)$	$O(1)$	$O(\log_k(n))$

PLM

较早的预训练语言模型如 word2vec (Mikolov et al. 2013), GloVe (Erhan et al. 2010) 等词嵌入模型在语料库上将词映射到静态的向量，这些向量相当于**上下文无关**的词表征，无法表示词的多义性。

Peters et al. (2018) 提出的 ELMo 使用双向 LSTM 网络计算上下文表征。ELMo 在使用时仅作为文本特征提取器嵌入到下游任务模型。随着 transformer 模型和预训练-微调模式的出现，仅作为特征提取器的预训练模型很快消失，ELMo 基本成为这类预训练模型的绝唱。

PLM 结构

在 transformer 时代，PLM 根据模型架构可以分为三种：

- Encoder based(e.g., BERT(Devlin et al. 2019), RoBERTa(Liu et al. 2019), XLNet(Yang et al. 2019).)
- Decoder based(e.g., GPT-1(Radford, Narasimhan, et al. 2018), GPT-2(Radford, Wu, et al. 2019), GPT-3(Brown et al. 2020).)
- Encoder-Decoder based(e.g., BART(Lewis et al. 2019), MASS(Song et al. 2019).)

模型的结构可以理解为用于计算表征的函数形式，对于参数化的深度模型 $f(\cdot;\Theta)$ 而言，就是 f 的形式

除形式外，还需要合适参数 Θ 才能实现好的表征计算，参数在训练中优化的方向则由**训练目标**决定

预训练目标

语言模型预训练指在无标注的语料库上训练模型参数，通常使用自监督模式。**预训练目标**这一概念所涵盖的范围包括**自监督的具体方法**和**损失函数**在 PLM 中主要有三种预训练目标，基本与前述三种模型结构相对应：

- Autoencoding Modeling $\Rightarrow$ Encoder Model
- Autoregressive Modeling $\Rightarrow$ Decoder Model
- Sequence2Sequence Modeling $\Rightarrow$ Encoder-Decoder Model

Autoencoding Modeling

Autoencoding 的自监督是通过降噪受损的文本实现的，具体来说，就是首先向原始文本中注入噪音，将其变为受损的文本，然后训练模型恢复受损的部分，训练的损失仅根据受损部分的文本计算，损失函数可以表示为:

$$\mathcal{L}_{\mathrm{AE}}(\hat{\mathbf{X}}) = \sum_{x_i \in m(\mathbf{X})} \log P(x_i | \mathbf{X} \backslash m(\mathbf{X}))$$

其中 $\mathbf{X}$ 是输入序列，$\hat{\mathbf{X}}$ 是原始文本序列经过噪音函数后的文本序列 $\hat{\mathbf{X}} = f_{\mathrm{noise}}(\mathbf{X})$，$m(\mathbf{X})$ 是输入序列中受损的部分。

Autoregressive Modeling

Autoregressive Modeling 有时也称 Standard Language Modeling(SLM), GPT 系列模型就是 Autoregressive 模型。Autoregressive 模型是一种单向生成模型，它的自监督模式是通过**上文信息**训练模型预测生成下一个词，训练损失为：

$$\mathcal{L}_{\mathrm{AR}}(\mathbf{X}) = \sum_{i=1}^{|\mathbf{X}|} \log P(x_i | x_1, x_2, \ldots, x_{i-1})$$

Sequence-2-Sequence Modeling

Seq2Seq 的自监督过程是 Autoencoding 和 Autoregressive 过程的结合：首先向输入文本加入噪音，然后训练模型基于受损的文本使用编码器和解码器恢复出原始文本，其训练损失是恢复文本与原始文本之间的负对数似然：

$$\mathcal{L}_{SS} = \sum_{i=1}^{|\mathbf{X}|} \log P(x_i | \hat{\mathbf{X}}, x_1, x_2, ..., x_{i-1})$$

总结

三种与模型结构/训练目标的特点：

- Autoencoding: 双向注意力，token 的表征计算基于序列中的所有 tokens
- Autoregressive: 单向注意力，token 的表征计算基于序列中前面的所有 tokens(包括自己)
- Seq2Seq: 混合注意力，编码阶段 token 的表征计算基于所有 tokens，解码阶段 token 的表征计算基于编码阶段的所有 tokens 和解码阶段前面的 tokens(包括自己)

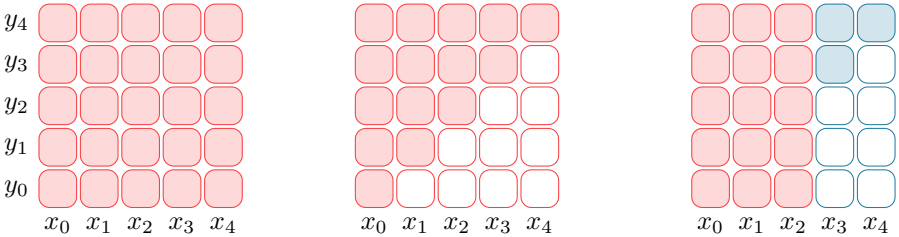
如何实现？

- 注意力掩码
- 交叉注意力

注意力掩码

通过注意力掩码 (Attention Mask) 控制**单向**的还是**双向**的

$$\mathrm{Attn}(\mathbf{Q},\mathbf{K},\mathbf{V}) = \mathrm{softmax}\left(\frac{\mathbf{Q}\mathbf{K}^\top}{\sqrt{d_k}} + \mathbf{M}\right)\mathbf{V}$$

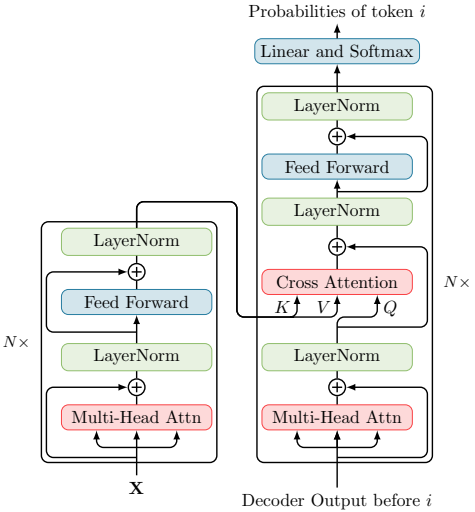


(a) Full Attention (b) Left2Right Attention (c) Mix Attention

交叉注意力

(Encoder-Decoder 模型) 通过交叉注意力实现对 Encoder 表征的注意

Corss Attention 中，**K** 和 **V** 来自 Encoder



一些噪声函数 (Lewis et al. 2019)

- Token Masking: 随机采样一些 tokens 并使用 [MASK] 替换
- Token Deletion: 随机删去一些 tokens，与 Token Masking 相比，这种方法迫使模型预测被删除的位置
- Text Infilling: 随机采样一些文本片段，并用遮罩 [MASK] 替换。这种噪声迫使模型预测被替换的文本片段的长度
- Sentence Permutation: 将文档按照句号分割成不同的句子，然后随机排列句子的顺序。这种噪声迫使模型学习同一文档中句子的顺序
- Document Rotation: 随机选择一个 token，然后将文本旋转到以这个 token 为开头的状态。这种噪声训练模型识别文本开头的能力

References I

Ba, Jimmy Lei, Jamie Ryan Kiros, and Geoffrey E. Hinton (July 21, 2016). "Layer Normalization". arXiv: 1607.06450 [cs, stat]. URL: https://arxiv.org/abs/1607.06450 (visited on 09/01/2021).

Bengio, Yoshua et al. (Mar. 2003). "A Neural Probabilistic Language Model". In: *Journal of Machine Learning Research* 3 (null), pp. 1137–1155. ISSN: 1532-4435.

Bordes, Antoine et al. (2013). "Translating Embeddings for Modeling Multi-relational Data". In: Advances in Neural Information Processing Systems, p. 9.

Brown, Tom et al. (2020). "Language Models Are Few-Shot Learners". In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Ed. by H. Larochelle et al. Vol. 33. Curran Associates, Inc., pp. 1877–1901. URL: https://proceedings.neurips.cc/paper/2020/file/1457c0d6bfcb4967418bfb8ac142f64a-Paper.pdf.

Devlin, Jacob et al. (2019). "BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding". In: *Proceedings of the 2019 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies, Volume 1 (Long and Short Papers)*. Minneapolis, Minnesota: Association for Computational Linguistics, pp. 4171–4186. DOI: 10/ggbwf6. URL: https://aclanthology.org/N19-1423.

References II

Erhan, Dumitru et al. (Mar. 31, 2010). "Why Does Unsupervised Pre-training Help Deep Learning?" In: *Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*. Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics. JMLR Workshop and Conference Proceedings, pp. 201–208. URL: https://proceedings.mlr.press/v9/erhan10a.html (visited on 04/18/2022).

Geva, Mor et al. (2021). "Transformer Feed-Forward Layers Are Key-Value Memories". In: *Proceedings of the 2021 Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*. EMNLP 2021. Online and Punta Cana, Dominican Republic: Association for Computational Linguistics, pp. 5484–5495. DOI: 10.18653/v1/2021.emnlp-main.446. URL: https://aclanthology.org/2021.emnlp-main.446 (visited on 03/28/2022).

He, Junxian et al. (Feb. 2, 2022). "Towards a Unified View of Parameter-Efficient Transfer Learning". arXiv: 2110.04366 [cs]. URL: http://arxiv.org/abs/2110.04366 (visited on 03/24/2022).

He, Kaiming et al. (June 2016). "Deep Residual Learning for Image Recognition". In: *2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), pp. 770–778. DOI: 10/gdcfkn.

References III

Ioffe, Sergey and Christian Szegedy (June 1, 2015). "Batch Normalization: Accelerating Deep Network Training by Reducing Internal Covariate Shift". In: *Proceedings of the 32nd International Conference on Machine Learning*. International Conference on Machine Learning. PMLR, pp. 448–456. URL: https://proceedings.mlr.press/v37/ioffe15.html (visited on 04/17/2022).

Joshi, Mandar et al. (Jan. 17, 2020). "SpanBERT: Improving Pre-training by Representing and Predicting Spans". arXiv: 1907.10529 [cs]. URL: http://arxiv.org/abs/1907.10529 (visited on 09/16/2021).

Lewis, Mike et al. (Oct. 29, 2019). "BART: Denoising Sequence-to-Sequence Pre-training for Natural Language Generation, Translation, and Comprehension". arXiv: 1910.13461 [cs, stat]. URL: http://arxiv.org/abs/1910.13461 (visited on 08/15/2021).

Liu, Yinhan et al. (July 26, 2019). "RoBERTa: A Robustly Optimized BERT Pretraining Approach". In: arXiv: 1907.11692 [cs]. URL: http://arxiv.org/abs/1907.11692 (visited on 09/06/2021).

Mikolov, Tomas et al. (Sept. 6, 2013). "Efficient Estimation of Word Representations in Vector Space". arXiv: 1301.3781 [cs]. URL: http://arxiv.org/abs/1301.3781 (visited on 04/17/2022).

Peters, Matthew E. et al. (Mar. 22, 2018). "Deep Contextualized Word Representations". arXiv: 1802.05365 [cs]. URL: http://arxiv.org/abs/1802.05365 (visited on 09/13/2021).

References IV

Qin, Yujia et al. (2021). "ERICA: Improving Entity and Relation Understanding for Pre-trained Language Models via Contrastive Learning". In: *Proceedings of the 59th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics and the 11th International Joint Conference on Natural Language Processing (Volume 1: Long Papers)*. Proceedings of the 59th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics and the 11th International Joint Conference on Natural Language Processing (Volume 1: Long Papers). Online: Association for Computational Linguistics, pp. 3350–3363. DOI: 10/gmfzxp. URL: https://aclanthology.org/2021.acl-long.260 (visited on 11/01/2021).

Radford, Alec, Karthik Narasimhan, et al. (2018). "Improving Language Understanding by Generative Pre-Training". In: p. 12.

Radford, Alec, Jeffrey Wu, et al. (2019). "Language Models Are Unsupervised Multitask Learners". In: p. 24.

Song, Kaitao et al. (June 21, 2019). "MASS: Masked Sequence to Sequence Pre-training for Language Generation". arXiv: 1905.02450 [cs]. URL: http://arxiv.org/abs/1905.02450 (visited on 09/15/2021).

Vaswani, Ashish et al. (2017). "Attention Is All You Need". In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Ed. by I. Guyon et al. Vol. 30. Curran Associates, Inc. DOI: 10/gpnmtv. URL: https://proceedings.neurips.cc/paper/2017/file/3f5ee243547dee91fbd053c1c4a845aa-Paper.pdf.

References V

Yang, Zhilin et al. (2019). "Xlnet: Generalized Autoregressive Pretraining for Language Understanding". In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. Vol. 32. URL: http://papers.nips.cc/paper/8812-xlnet-generalizedautoregressive-pretraining-for-language-understanding.pdf.

Zhang, Zhengyan et al. (June 4, 2019). "ERNIE: Enhanced Language Representation with Informative Entities". arXiv: 1905.07129 [cs]. URL: http://arxiv.org/abs/1905.07129 (visited on 09/13/2021).

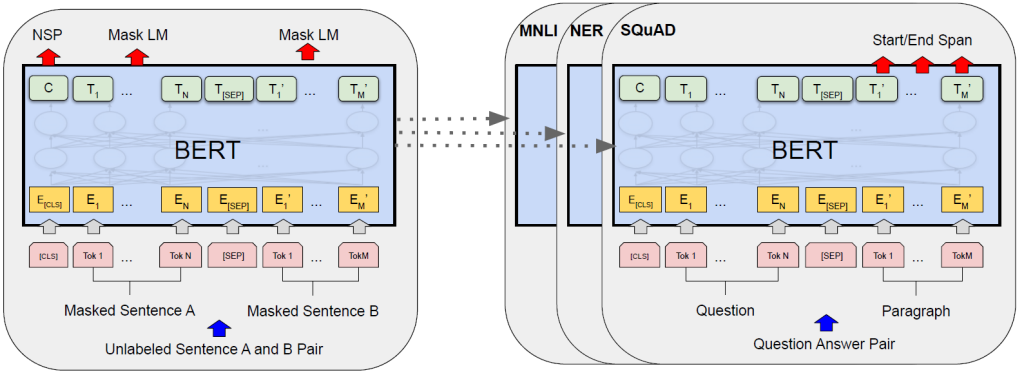
BERT

BERT 的基本模型是一个双向 transformer 编码器，在经过大量文本数据的预训练之后，在 BERT 输出端添加 task head 并微调可以在下游任务上取得 sota 的结果，优于很多为任务特殊设计的模型结构。BERT 的出现使预训练-微调的模式成为 NLP 任务的事实标准

BERT 的模型结构直接使用了 transformer(Vaswani et al. 2017) 的 encoder 部分, 作者在论文 “BERT: Pre-training of Deep Bidirectional Transformers for Language Understanding” 中设计了两种大小的模型：

$\text{BERT}_{\text{BASE}}(L = 12, H = 768, A = 12, \mathit{TotalParameters} = 110M)$ 和 $\text{BERT}_{\text{LARGE}}(L = 24, H = 1024, A = 16, \mathit{TotalParameters} = 340M)$. 其中，$L$ 是 transformer 层层数, H 是模型隐藏维度，A 是 multi-head attention 中的 head 数目

BERT 的预训练-微调模式



Pre-training

Fine-Tuning

BERT 的 embedding 和输出表征 I

BERT 的输入文本序列经过如下的处理后输入 embedding 层：

- 在整个序列头部添加特殊 token: [CLS]
- 在序列尾部以及句子的分隔处 (在多句场景下) 添加特殊 token: [SEP]

其中 [SEP] 指示句子的分割，这在部分多句任务中有用。[CLS] token 的表征将被用于句级分类任务，即 Sequence Classification 任务

BERT 的 embedding 和输出表征 II

BERT 的 embedding 由三部分组成：

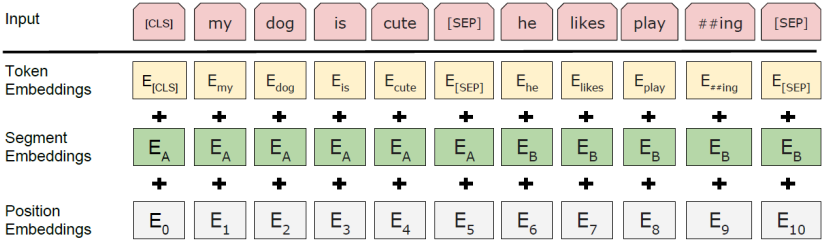


Figure 2: BERT input representation. The input embeddings are the sum of the token embeddings, the segmentation embeddings and the position embeddings.

其中 segment embedding 指示该 token 属于输入文本中哪个句子 (多句场景下)，position embedding 指示该 token 在输入序列中的位置

Pre-training

BERT 使用两个预训练任务：

- Masked Language Modeling(MLM): 在输入序列中随机抽取一部分 tokens，并替换为 [MASK], 然后使用 BERT 去预测这些 tokens
- Next Sentence Prediction(NSP): 使用上文所说的 [CLS] token 进行序列分类，判断输入中的两个子句是不是原始文档中连续的句子

对于 MLM，其 [MASK] 的引入导致预训练和下游任务的割裂，BERT 使用下述策略弥补这种割裂：对于被选中的 tokens(15%)，并不总是将其替换为 [MASK], 而是：

- 80% 替换为 [MASK]
- 10% 保持不变
- 10% 替换为字典中的随机词

fine-tuning

BERT 的预训练过程相当于为语言生成了较优的表征，在下游任务中使用 BERT 即使用这些表征。可以直接在 BERT 之后添加任务相关的层并端到端训练所有参数。例如，在分类任务中添加线性层和 softmax 函数

The BERT Family

RoBERTa(Liu et al. 2019) 在 BERT 的基础上使用更多的数据进行了更多的训练，同时研究了 NSP 任务对性能的影响; XLNet(Yang et al. 2019) 通过排序语言模型将 MLM 任务转化为 Autoregressive 的形式，消除了 MLM 中的特殊 token: [MASK]; SpanBERT(Joshi et al. 2020) 在 BERT 的 MLM 基础上改进，使用 text span 粒度的 MASK 策略，提升 BERT 的语言建模能力; ERINE(Zhang et al. 2019) 在 BERT 的基础上添加同样是 Transformer Encoder 结构的 Knowledge-Encoder，并使用 TransE(Bordes et al. 2013) 作为嵌入层编码输入文本中的实体提及，在两种编码器之上使用知识融合层将实体表征融合到语言表征以实现语言表征中的实体知识注入；ERICA(Qin et al. 2021) 关注于实体和关系的知识，在 BERT 的预训练过程中添加实体和关系相关的训练目标: Entity Discrimination, ED 和 Relation Discrimination, RD 实现了结构化知识向 PLM 的注入；