[Transformer 101系列] Perplexity指标究竟是什么?

aaronxic
清华大学 计算机科学与技术硕士

开篇

大家好，我是aaronxic，大家可以叫我小A。最近由于项目需要开始关注transformer+相关的进展，结果眼花缭乱的工作让大脑计算存储都严重溢出。围绕transformer相关的进展日新月异，难怪陆奇都说都有点赶不上大模型时代的狂飙速度。

网上不乏大量优秀文章介绍transformer的方方面面，观点非常有insight，分析也极尽的详实。但是从新手角度看仍然希望有这样的transformer上手资料

- 内容覆盖相对较全。能把transformer相关的算法、训练和部署方法一齐串讲，让新手快速建立该领域的know-how
- 详略得当+，兼顾bottom-up和top-down。对容易被大部分文章忽略的细节bottom-up详细理清逻辑链，对大量看似独立但又相互关联的知识进行top-down梳理。

笔者小A从自己实际入坑的经验出发，尝试总结梳理出新手友好的transformer入坑指南。一方面能倒逼自己理清知识脉络，另一方面希望能让后面的新同学少走弯路，更快拿到自己想要的知识。

本系列计划从以下五个方面对transformer进行介绍

- 算法1: NLP中的transformer网络结构
- 算法2: CV中的transformer网络结构
- 算法3: 多模态下的transformer网络结构
- 训练: transformer的分布式训练
- 部署: transformer的tvm量化与推理

由于笔者小A并没有亲手撸过上述内容的所有细节，大部分是通过研究代码和精读优秀文章的方式总结而来，本质上是个拾人牙慧+的知识搬运工，所以终究是纸上谈兵。因此希望各方有实际经验的大佬猛锤，思维碰撞才生火花，真理越辩越明。

每个方面可能由若干篇文章组成，如果对某些部分感兴趣可以关注小A，后续会逐步更新相应章节。接下来是本系列的第一篇，侧重介绍NLP中最常用的perplexity指标究竟是什么含义

本文会先从大家熟悉的entropy指标开始，逐步介绍针对自然语言的改进版N-gram Entropy指标，最后介绍基于此改进的perplexity指标。

Entropy (无先验)

知乎 首发于 思维振荡器

熟悉的熵的定义，可以计算自然语言 L 的熵

$$H(x) = -\sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log_2 p(x)$$

有时候也简写为 $\mathbf{E}_{p(x)}[-\log_2 p(x)]$，含义是在分布 $p(x)$ 下计算 $-\log_2 p(x)$ 的期望

如果我们没有任何观察样本和先验，那么26个字母是均匀分布的，那么可以计算自然语言L的熵为

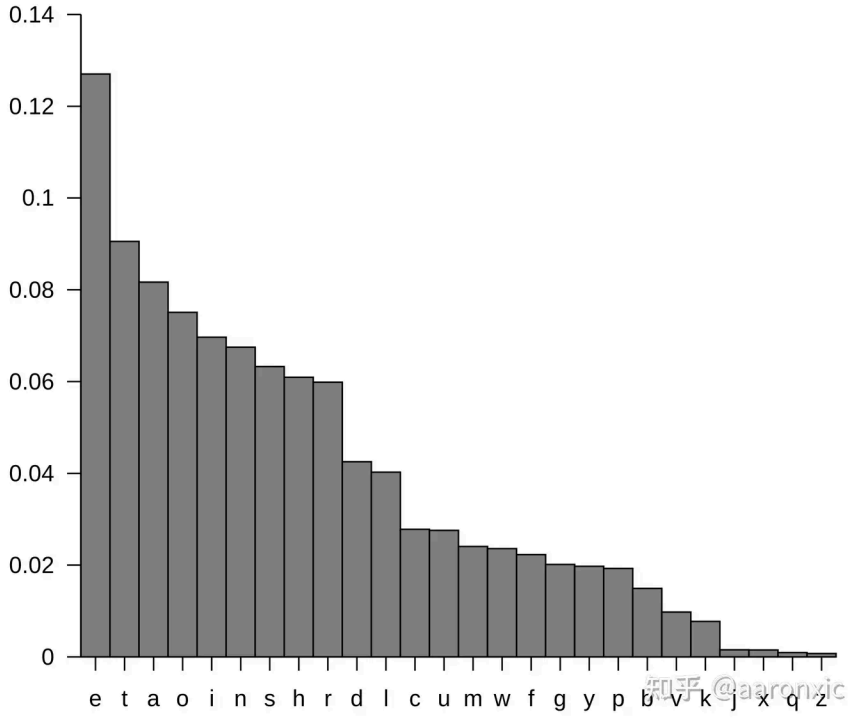
$$H_1(x) = \log_2 26 = 4.70\text{bit}$$

这个含义是编码 $\mathcal{X}$ 中每个字符需要的比特数是4.7比特

N-gram Entropy (有先验)

但是显然，在真正的自然语言中，有大量先验+可以使用

- 先验1: 不同字母出现的概率差别很大，例如e出现的概率12.70%，z出现的概率是0.07%，那么对e编码可以用更少的比特数，对z编码可以用较长的比特数。如下统计了英文中小写字母常见的频率，如果将其带入 $p(x)$，可以得到 $H_2(x) = 4.14\text{bit}$，小于 $H_1(x)$



- 先验2: 给出上文，下文每个字符出现的概率会有很大不同。例如虽然单字符e出现概率比h高，但是t后面接着h的概率要比e高

由上可知，自然语言 L 的熵 $H(x)$ 是跟概率 $p(x)$ 紧密相关的值，并且原始的熵没法把先验2纳入考虑范围，对此香农+在1951年论文<Prediction and Entropy of Printed English>中专门针对自然语言提出了N-gram Entropy。

给定自然语言 L 的足够长的字符序列 S，考察所有长度为N的子字符串 $b_N = (w_1, w_2, \ldots, w_N)$，定义N-gram Entropy F_N 如下。

$$\begin{aligned} F_N &= -\sum_{b_N} p(b_N) \log_2 p(w_N | b_{N-1}) \\ &= -\sum_{b_N} p(b_N) \log_2 p(b_N) - (-\sum_{b_{N-1}} p(b_{N-1}) \log_2 p(b_{N-1})) \end{aligned}$$

个人解读如下

知乎 首发于 思维振荡器

先验2纳入指标设计了。

- 对 b_N 可以求和是因为可以沿着字符序列S不断滑窗可以得到很多组 b_N 数据

如果定义 $K_N = -\sum_{b_N} p(b_N) \log_2 p(b_N)$，则

$$F_N = K_N - K_{N-1}$$

容易看出 K_N 就是连续N个字符的熵 $H(b_N)$，即前文的 $\mathbf{E}_{p(b_N)}[-\log_2 p(b_N)]$

当 N 逐渐增大的时候， F_N 越来越逼近自然语言 L 真正的熵 H，即

$$H = \lim_{n\to\infty} F_n$$

并且 F_N 的值有单调递减的特性(完整证明可以参考博文)

$$F_0 > F_1 > \ldots > F_N > F_\infty = H$$

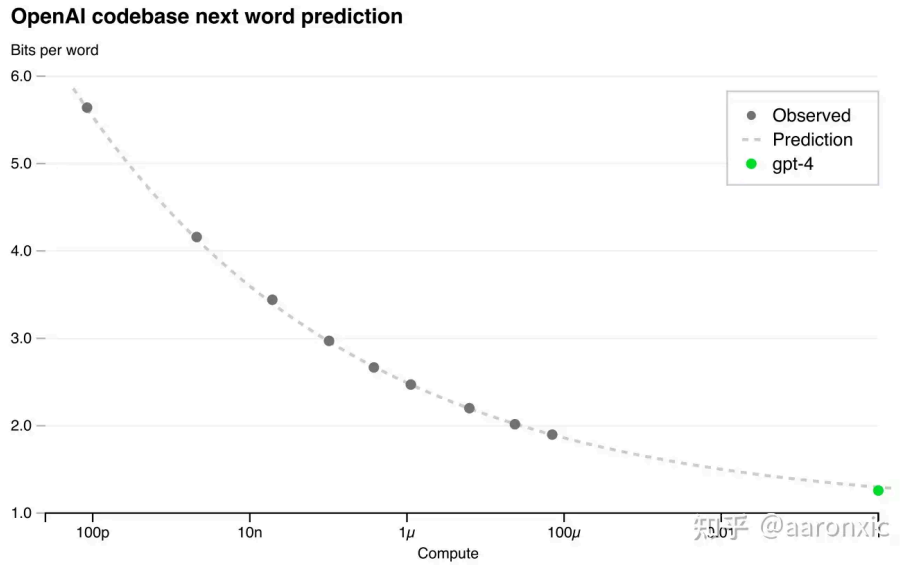
当N比较小的时候，可以通过语料简单统计得到

- $F_0 = 4.7\text{bit}$，即前文的 $H_1(x)$。注意原始 F_N 表达式中 $N = 0$ 时是无意义的， F_0 的含义是香农特殊定义的
- $F_1 = 4.14\text{bit}$，即前文的 $H_2(x)$。这个相当于独立字符做统计
- $F_2 = 3.56\text{bit}$。这个是考虑两两字符出现的情况。

当N比较大的时候，出现了单词之间的空格，此时往往会加入空格字符，共27个符号。由于这个确切的值比较难估计，往往是给出区间。例如

- 估计1: 香农给出的是0.6-1.3bit
- 估计2: Cover和King则认为1.25bit
- 估计3: 一般经典认知是1.25bit左右 (错了可以纠正我)

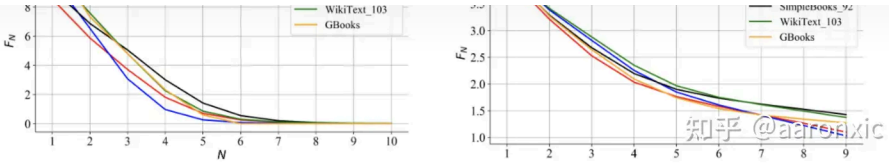
值得注意的是，上述都是character-level的N-gram entropy，对应的还有word-level和subword-level，在对比数值的时候要留意。例如GPT4汇报的是word-level的指标，叫BPW，这个指标先按下不表，大家心里有个印象，后面回来再介绍。



不同尺度模型的BPW指标

一个常见的问题是character-level和word-level可以相互转化吗？按笔者小A的理解，这个问题没有trival的转换公式，只能说两者变化趋势基本一致

知乎 首发于 思维振荡器



此外从变化趋势还能看出一个很有趣的insight✦，就是随着N的增大，曲线下降更快的数据集更容易拟合，像WikiText-2就相对容易，但是SimpleBooks-92就比较难。

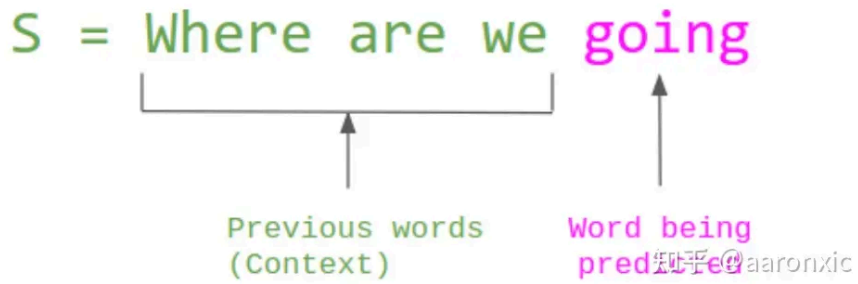
Cross-Entropy与Perplexity

前面无先验的✦Entropy和有先验的N-gram Entropy都是描述自然语言 L 本身的固有性质熵，目的是衡量这种自然语言 L 的信息量和复杂度。那么对于一个给定的Language Model模型，例如N-gram模型或者Transformer模型✦

- 问题1: 我们怎么衡量这个LM的熵呢?
- 问题2: 这个LM的熵跟模型的最终表现有直接关系吗?

回答这两个问题之前，我们得先弄清楚LM数学上一般是怎么建模的，最常见的方式如下。

$$\begin{aligned} P_{(w_1,w_2,\ldots,w_n)} &= q(w_1)q(w_2|w_1)q(w_3|w_1,w_2)\ldots q(w_n|w_1,w_2,\ldots,w_{n-1}) \\ &= \prod_{i=1}^{n} q(w_i|w_1,\ldots,w_{i-1}) \end{aligned}$$



本质上就是看到previous words，预测next word。这里最核心的条件概率 $q(w_i|w_1,\ldots,w_{i-1})$ 既可以用N-gram语言模型(例如KenLM)，也可以用Transformer模型(例如GPT4)来建模。

给定上述模型后，一种朴素的思想是，我们基于N-gram Entropy的定义，尝试把 $\mathbf{E}p(b_N)[-\log_2 p(w_N|bN-1)]$ 换成 $\mathbf{E}p(b_N)[-\log_2 q(w_N|bN-1)]$ ，这里的 $q(w_N|b_{N-1})]$ 正是LM模型的核心输出。

这里我们其实已经无意中写出了cross-entropy的定义，展开就是

$$\begin{aligned} \mathbf{H}(\mathrm{LM}) = \mathbf{H}(P,Q) &= \mathbf{E}_{p(b_N)}[-\log_2 q(w_N|b_{N-1})] \\ &= -\sum_{b_N} p(b_N)\log_2 q(w_N|b_{N-1}) \\ &= -\sum_{b_N} p(w_N|b_{N-1})p(b_{N-1})\log_2 q(w_N|b_{N-1}) \\ &\approx -\sum_{b_N} 1\cdot\frac{1}{m}\log_2 q(w_N|b_{N-1}) \\ &= -\frac{1}{m}\sum_{b_N}\log_2 q(w_N|b_{N-1}) \\ &= -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\log_2 q(w_i|w_1,w_2,\ldots,w_{i-1}) \end{aligned}$$

注意这里 ≈ 的关键一步

- 对于 $p(b_{N-1})$ ，这里同样简化计算，假设滑窗后一共产生 m 个 b_N ，即 $|b_N| = m$ ，那么每个特定的 b_{N-1} 的概率就是 $1/m$

以及最后一步

- 由于滑窗后共有m个 b_N ，把每个 b_N 展开，积分个数变成m个
- 首先 $q(w_N|b_{N-1})$ 写开是 $q(w_N|w_1, w_2, \ldots, w_{N-1})$ 。注意无论是N-gram还是GPT4模型，都有窗口大小的限制，当前文内容 $(w_1, w_2, \ldots, w_{i-1})$ 不足N或者超过N的时候，都会补齐或者截断到N大小。因此最后一行的每个积分项 $q(w_i|w_1, w_2, \ldots, w_{i-1})$ 都可以通过补齐或者截断的方式变成 $q(w_N|w_1, w_2, \ldots, w_{N-1})$ (这里可能会比较绕，可以反复品味)

如果我们进一步把 $-\frac{1}{m}$ 和 $\sum_{i=1}^{m}$ 放到对数 $\log_2$ 里面，可以得到

$$\begin{aligned}\mathbf{H(LM)} = \mathbf{H(P, Q)} &\approx -\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\log_2 q(w_i|w_1, w_2, \ldots, w_{i-1}) \\ &= \log_2\left(\prod_{i=1}^{m}\frac{1}{q(w_i|w_1, w_2, \ldots, w_{i-1})}\right)^{\frac{1}{m}} \\ &= \log_2(\mathbf{Perplexity(LM)})\end{aligned}$$

因此可以得到 (严格来说是约等于)

$$2^{\mathbf{H(LM)}} = 2^{\mathbf{H}(P,Q)} = \mathbf{Perplexity(LM)}$$

这个其实很好记忆，就是

- 假如一个LM模型的熵是4.7比特，那么就相当于每次生成下个词的时候扔一个 $2^{4.7} = 25.99$ 面的骰子。这个25.99就是Perplexity
- 反过来如果一个LM模型的Perplexity是31.1，那么相当于每次生成下个词的时候扔一个31.1面的骰子，这个LM模型的熵是 $\log_2 31.1 = 4.95$ 比特

每次扔骰子的面越少，说明这个LM预测越确定性地倾向于某个token，对自然语言做了某些压缩，学到了non-trival的东西

注意这里的底可以从2换成e，只要保持跟熵的定义一致即可

此外关于前文的Bits per Word(BPW)或者Bits per Character(BPC)，我理解其实跟 $\mathbf{H(P, Q)}$ 是一回事儿，只是BPW是word-level，BPC是character level。(看到很多文章说的是有额外对序列长度求平均，例如资料1和资料2，小A不是特别理解，还请理解的小伙伴赐教。)

Perplexity越低越好?

上一节回答了问题1中如何计算LM的熵，那我们追求更低的Perplexity就一定有好处吗?

- 在XLNet论文里面说越低的perlexity可能会损害下游任务的精度
- RoBERTa论文里面说对于像RoBERTa这样encoder-only结果的网络，perplexity越低那么在NLU任务表现就越好

因此可见perlexity是不错的引领性指标，但最终的判别标准还是得结合下游任务表现一起考察

结尾

总的来说Perplexity/Cross-Entropy/Bits Per Character都是类似的东西，他们都是围绕熵来刻画LM的信息量和复杂度。

最后强烈推荐阅读Evaluation Metrics for Language Modeling，配合本文食用效果更佳。此外由于笔者小A刚上手transformer相关内容，难免有错的地方，还请大佬们指正。

知乎 首发于 思维振荡器

系列文章导览

aaronxic：[Transformer 101系列] Perplexity指标究竟是什么?
77 赞同 · 7 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] 初探LLM基座模型
481 赞同 · 34 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] ChatBot是怎么炼成的?
56 赞同 · 3 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] 多模态的大一统之路
206 赞同 · 6 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] AIGC组成原理(上)
60 赞同 · 4 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] AIGC组成原理(下)
45 赞同 · 2 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] LLM分布式训练面面观
142 赞同 · 12 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] LLM模型量化世界观(上)
122 赞同 · 7 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] LLM模型量化世界观(下)
32 赞同 · 1 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] 深入LLM投机采样(上)
43 赞同 · 1 评论 文章 

aaronxic：[Transformer 101系列] 深入LLM投机采样(下)
33 赞同 · 0 评论 文章 

参考资料

Evaluation Metrics for Language Modeling

GPT-4 的 Bits Per Word 指标是什么意思

KL散度理解

一文搞懂Language Modeling三大评估标准

求通俗解释NLP里的perplexity是什么？ - 知乎

知乎 首发于 思维振荡器

编辑于 2024-08-07 08:10 · IP 属地北京

深度学习（Deep Learning） Transformer 新手教程

理性发言，友善互动

7 条评论 默认 最新

momo
Perplexity是不是越低越好，核心在于是不是过拟合。上古paper，例如5年前的，做语言模型，都会训练很多轮，这样Perplexity是会越来越低，但是因为过拟合到语料上了，自然会损害下游任务。现在的做法是数据（充分排重充分清洗）都只过一轮，理论上不会过拟合，Perplexity越低越好，在下游任务也基本是正相关的
2023-11-06 · 广东 回复 6

阿瞒
楼主，这一篇的链接有吗？ “部署: transformer的tvm量化与推理”
02-04 · 上海 回复 喜欢

aaronxic 作者
在写了哈，会先写量化
02-06 · 北京 回复 喜欢

D2DL
“CV中的transformer网络结构”还有么？ViT Swim VIT之类的工作还能讲解一下么？非常感谢，收益颇丰
2023-11-30 · 辽宁 回复 喜欢

aaronxic 作者
可以参看《Transformer101系列》的多模态篇，aaronxic：[Transformer 101系列] 多模态的大一统之路
2023-12-01 · 宁夏 回复 喜欢

CharlesRiggins
赞
2023-11-04 · 北京 回复 喜欢

momo
非常赞，请继续搬运
2023-10-31 · 广东 回复 喜欢

理性发言，友善互动

思维振荡器
在这里不同的思维发生碰撞和反应，产生新的思维

大语言模型专栏
收集大语言模型优质知乎内容

推荐阅读