Многозадачное обучение языковых моделей, основанных на механизме внутреннего внимания

Погорельцев С. А., н.р. Полякова И. Н.

МГУ им. Ломоносова, ф-т ВМК, каф. АЯ

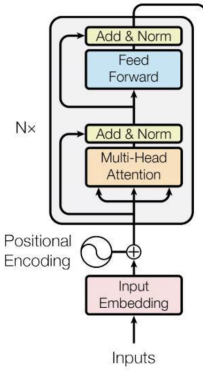
2022

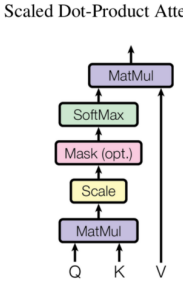
Многозадачное обучение

Многозадачное обучение (MultiTask Learning) - подполе машинного обучения, в котором одновременно решаются несколько задач, при этом используются общие черты и различия между задачами. Это может привести к повышению эффективности обучения и точности прогнозирования для моделей, специфичных для конкретных задач, по сравнению с отдельным обучением моделей.

Языковые модели, основанные на механизме внутреннего внимания

Да да, я про Трансформемеры и в частности BERT-подобные модели





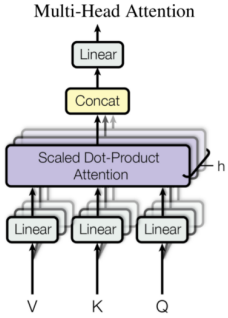


Figure 2: (left) Scaled Dot-Product Attention. (right) Multi-Head Attention consists of several attention layers running in parallel.

Формализация понятия задача

$$T_i = \{p_i(x), p_i(y|x), L_i\} \quad (1)$$

- $p_i(x)$ - распределение входных данных
- $p_i(y|x)$ - распределение меток (классификация) / значений (регрессии) в зависимости от входных данных
- L_i - функция потерь

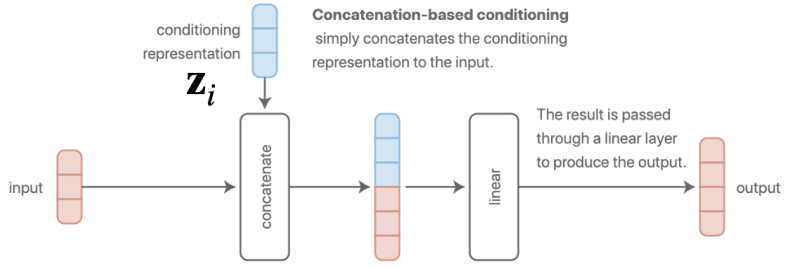
Выборки для задачи

- D_i^{train} - обучающая
- D_i^{val} - валидационная
- D_i^{test} - тестовая

Гипотезы многозадачной модели (Hard Parameter Sharing)

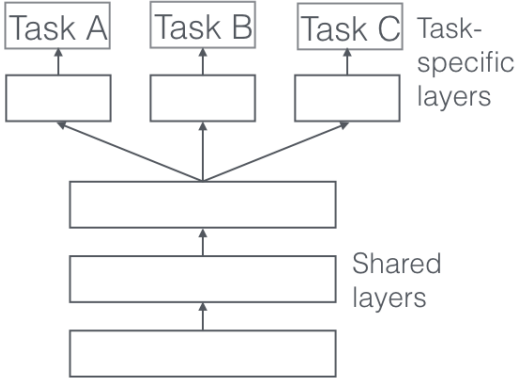
Основной вопрос: **Как организовать "переключение" на уровне модели?**

- Конкатенация one-hot вектора задачи к скрытому представлению



- Добавление вектора смещения - смещение данных задачи
- Умножение - изменение масштаба данных задачи
- Архитектура с несколькими головами (популярна, хорошо работает на практике, в дальнейшем буду говорить о ней, т. к. использую её в работе)

Архитектура с несколькими головами



Введём некоторые обозначения и уточним понятие задачи

- H_i - специфичные для задачи слои - голова модели
- E - общие слои, формирующие представления для голов H_i

Тогда i-ая задача:

$$T_i = \{p_i(x), p_i(y|x), H_i, L_i\} \qquad (2)$$

Forward pass для задачи T_i

$$F_i(x) = H_i \circ E \circ x = H_i(E(x)) \qquad (3)$$

Обучение многоголовой модели (популярные подходы)

- **Одна задача на батч** Данные всех задач разбиваются на батчи и эти батчи перемешиваются вместе. На каждой эпохе выбирается случайный j-ый батч соотвествующий задаче T_i $batch_j^i$, а затем всё (почти) как обычно.
- **Оптимизация (взвешенной) суммы функций потерь**
  - Собираются "метабатчи" $\{\text{batch}_{j_1}^1, \text{batch}_{j_2}^2, ..., \text{batch}_{j_n}^n\}$ - множество по 1 случайному батчу для каждой задачи (здесь n штук).
  - Для каждой i-ой задачи вычисляется $fwd_i = F_i(\text{batch}_{j_i}^i)$, $loss_i = L_i(f_i)$ и оптимизируется $loss = \sum_{i=1}^n w_i \, \text{loss}_i$, где $\forall i \; w_i > 0$.
  - w_i регулирует важность i-ой задачи при оптимизации

Я экспериментирую с обоими и кажется, что оптимизация суммы работает лучше ~~что в целом логично, т. к. первый вариант с точки зрения метоптов - тихий ужас~~

Алгоритм обучения с оптимизацией по одной задаче

for epochNum $\leftarrow \overline{0, N}$ **do**
  for all batch$_j^i \in$ *batches.shuffle*() **do**
    $outputs \leftarrow F_i(batch_j^i)$
    loss $\leftarrow L_i(outputs)$
    $F_i \leftarrow F_i - \alpha \nabla$ loss ▷ Тут может быть любой метод оптимизации
  end for
end for

Minibatch градиентный спуск здесь для упрощения примера, чаще используется Adam или AdamW для обучения Трансформеров (в т.ч. многозадачных)

Алгоритм обучения с оптимизацией по сумме функций потерь

for epochNum $\leftarrow \overline{0, N}$ **do** ▷ Итерация по эпохам
  for all metabatch$_j \in$ *metabatches.shuffle*() **do** ▷ Итерация по "метабатчам"
    loss $\leftarrow 0$
    for all batch$_j^i \in$ metabatch$_j$ **do** ▷ Итерация по задачам и их батчам
      $outputs_j^i \leftarrow F_i(\text{batch}_j^i)$
      $loss_j \leftarrow loss_j + w_i L_i(outputs_j^i)$
    end for
    loss$_j$.*backward*(); *optimizer.step*(); *optimizer.zero_grad*() ▷ *
  end for
end for

*: магия автоматического дифференцирования PyTorch, а на самом деле

$$\nabla loss_j(x^{i,j}) = \nabla \sum_{i=1}^{n} w_i L_i(H_i(E(x^{i,j}))$$ (продолжение на след. слайде)

Подробнее про обновление весов для суммы

Рассмотрим частную производную для k-ой координате

$$(\nabla loss_j(x^{i,j}))_k = \frac{\partial}{\partial x_k^{i,j}} \sum_{i=1}^{n} w_i L_i(H_i(E(x^{i,j})) = \sum_{i=1}^{n} w_i \frac{\partial L_i(H_i(E(x^{i,j}))}{\partial x_k^{i,j}}$$

Дальше считается как обычно, как и в предыдущем случае градиент от конкретной функции потерь с использованием правила цепочки $\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial x}$
После вычисления градиента делается шаг метода оптимизации обновляются все веса и для общих слоёв, и для **каждой головы** (backpropagation)

- Полученный метод - обобщение первого (если w - one-hot вектор, то получаем первый метод буквально)
- Снижается проблема забывания, поскольку оптимизация всего сразу
- Возможно, стоит совместить первый и второй подходы
  - Сначала сделать базовую оптимизацию для всех задач
  - Затем заниматься более тонкой настройкой позадачных весов

Некоторые важные особенности

- **Transfer Learning**: знания для одной задачи помогают в решении другой
- **Representation Learning**: перенос знаний часто связан с выучиванием общими слоями хороших векторных представлений входных признаков
- **Регуляризация**: многозадачное обучение работает как регуляризация и в случае переобучения всегда можно добавить задач для улучшения генерализации или сделать общими больше слоёв
- **Эффективное использование**: модель одна, пусть и крупнее

Сложности

- **Negative Transfer**: бывает, что задачи отрицательно влияют на решение друг друга. Наиболее вероятные причины:
  - Недостаточно выразительная модель (часто многозадачные модели больше)
  - Сложности с оптимизацией (межзадачная интерференция, задачи могут обучаться с разной скоростью)
- **Совместность задач**: какие задачи будут хорошо работать вместе? На этот вопрос ответ пока можно искать только экспериментами (за 1 эпоху понятно)

Проблема со средствами многозадачного обучения

Во время первых экспериментов обнаружил, что приходится писать много однообразного и сложного кода, потому, что хороших библиотек для многозадачного обучения Трансформеров пока нет (или я плохо искал)
В итоге, была разработна (и продолжает развиваться) небольшая библиотека, которая позволяет декларативно описывать задачи и сама собирает модель, готовит данные с учётом многозадачности

- Высокоуровневые готовые конфигурации для типичных задач
- "Ручки" для низкоуровневой настройки задач
- Средства для обучения в обычном цикле PyTorch
- Обучение с многозадачным аналогом Trainer (сейчас перерабатывается)

Пример простой конфигурации задач

```
tasks = Tasks([
        SequenceClassificationTask(
            name="danetqa",
            dataset_dict=load_dataset(...),
            preprocessor=Preprocessor([preprocess_danetqa]),
            tokenizer_config=TokenizerConfig(max_length=512),
        ),
        SequenceClassificationTask(
            name="headline_cause",
            num_labels=3,
            dataset_dict=load_dataset(...),
            preprocessor=Preprocessor([preprocess_headline_cause]),
            tokenizer_config=cfg
        )], model_path = "DeepPavlov/rubert-base-cased")
```

Низкоуровневая конфигурация задачи

```
Task(
    name = "название задачи (для индексации и логов)",
    head = <объект подкласса torch.nn.Module> | HFHead,
    data = Data(
        dataset_dict = <датасет в формате datasets.DatasetDict>,
        # другое (не обязательно, задано по-умолчанию)
        configured_tokenizer = ConfiguredTokenizer(
            model_path, padding = False, truncation = True, max_length
            ... # другие параметры токенизатора Hugging Face
        ),
        preprocessor = Preprocessor(...),
        columns, # поля, которые нужно приводить к формату PyTorch
        collator_class, collator_config
    )
)
```

Конфигурация головы модели

- Готовая из transformers

```
head = HFHead(class_ = AutoModelForSequenceClassification,
              config_params = {"num_labels": 2})
```

- Свой torch.nn.Module

```
class TwoLinears(nn.Module):
    def __init__(self, ...):
        layers = [nn.Linear(768, 2048), F.relu, nn.Linear(768, 2)]
        self.layers = nn.ModuleList(layers)
        self.loss = nn.CrossEntropyLoss()
    def forward(self, encoder_outputs, labels, ...):
        x = encoder_outputs[1]
        for layer in self.layers: x = layer.forward(x)
        return {"logits": x,
                "loss": self.loss(logits.view(-1, num_labels),
                                  labels.view(-1))}
head = TwoLinears(...)
```

Обучение с циклом на PyTorch

```
train_sampler = MultitaskBatchSampler(tasks.data, "train", batch_size=12)
model = MultitaskModel(encoder_path, tasks.heads)
# ... инициализация метода оптимизации, перенос модели на GPU ...
for epoch_num in range(num_epochs):
  for batch in train_sampler:
    batch.data.to(device)
    outputs = model.forward(batch.name, **batch.data)
    loss = outputs.loss
    print(f"Training loss: {loss} on task {batch.name}")
    loss.backward()
    optimizer.step()
    lr_scheduler.step()
    optimizer.zero_grad()
```

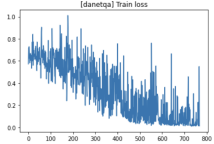
Готовность и открытый доступ

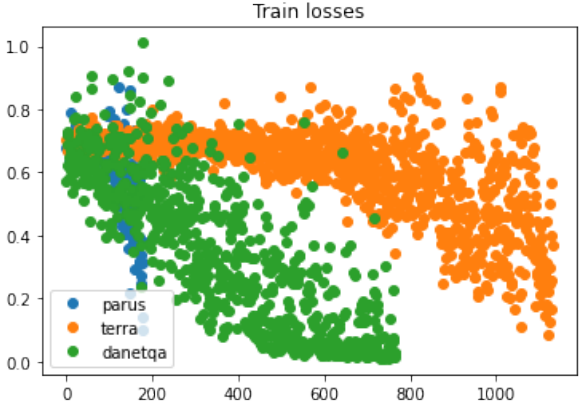
- Код в открытом доступе
  `https://github.com/s1m0000n/multitask-transformers`
- Буду рад новым контрибьюторам
- Нормальное состояние кодовой базы (pylint > 8)
- Новые вещи реализуются по мере того, что я использую для BKP
- Если есть идеи, что стоит улучшить / добавить - создавайте Issue
- Планируется публикация статьи

Цели и планы (неформально)

- Попытаться исправить / уменьшить проблемы оптимизации (важно)
- Решение проблемы Negative Transfer усложнением голов (важно)
- MTL как средство улучшения качества на малых выборках (важно)
  - В первоначальных экспериментах удалось улучшить качество задачи DaNetQA
  - Обучалось вместе с задачей NLI с позадачной оптимизацией
  - Планируется рассмотреть подробнее, после прочих улучшений
- Рассмотрение многозадачных трансформеров для русского (как получится)
- Попробовать свои силы в соревновании Russian SuperGLUE (если успею)

Сходимость


[danetqa] Train loss
[parus] Train loss
[terra] Train loss


Train losses
parus
terra
danetqa

Анализ первого эксперимента

- Одновременная сходимость возможна, даже с простым методом оптимизации
- Похоже, что с некоторого момента начинается перенос знаний
- Задачи с малыми выборками выигрывают от больших “соседей”
- Большое внимание стоит уделять оптимизации, например, хорошо работает увеличенное количество шагов разогрева (warmup steps)

Особенности способов оптимизации

- Обучение с оптимизацией по взвешенной сумме лоссов
  - Стабильная сходимость
  - Грубо оптимизирует всё сразу
  - Тяжело достичь очень высоких результатов на задачах (согласно метрикам)
  - Гипотеза: хорошо подойдёт для "грубой" и быстрой начальной оптимизации
- Обучение с позадачной оптимизацией
  - Медленная и нестабильная сходимость
  - Наблюдается следующее поведение
    - Хорошо пооптимизировал некоторую задачу
    - Одновременно в разной степени просел на других
    - Получаем в целом медленное скачкообразное улучшение лоссов и метрик
  - Гипотеза: хорошо подойдёт для "тонкой" донастройки по задачам, при условии, что проведена начальная "грубая" оптимизация

Предлагаемое улучшение подхода

1. Делаем первноначальную оптимизацию: пока не выйдем на плато - обучаемся по взвешенной сумме функций потерь
2. Далее - тонкая оптимизация, варианты
   - Просто позадачная оптимизация (выше вероятность проблемы забывания)
   - Цикл: N раз выполняем позадачную оптимизацию, а затем один раз по взвешенной сумме (борьба с забыванием)

Так же при первоначальной и точной оптимизациях можно иногда пропускать обучение на задачах, которые по лоссу / метрикам уже оптимизировались значительно лучше, чем остальные

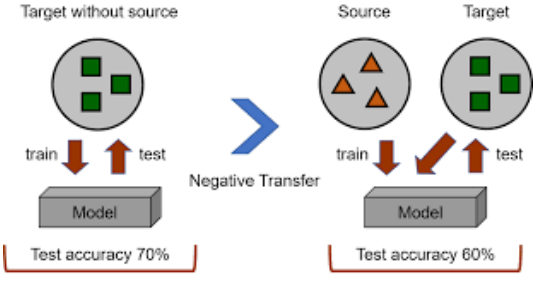
Это может помочь побороть проблему с разной скоростью сходимости задач

Это пока просто гипотеза, но я её обязательно проверю

Экспериментальные наблюдения

- Обучение с оптимизацией по взвешенной сумме лоссов
  - Стабильная сходимость
  - Грубо оптимизирует всё сразу
- Обучение с позадачной оптимизацией
  - Медленная и нестабильная сходимость
  - Наблюдается следующее поведение
    - Хорошо пооптимизировал некоторую задачу
    - Одновременно в разной степени просел на других
    - Получаем в целом скачкообразное улучшение лоссов и метрик

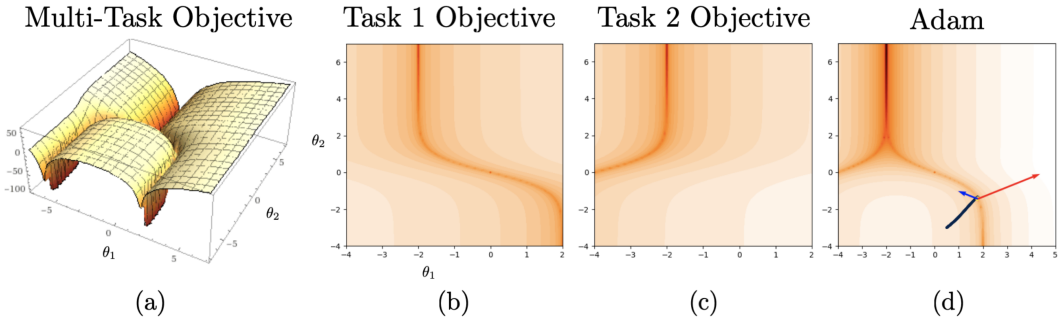
Подробнее о проблеме Negative Transfer



Основные причины

- Проблемы оптимизации
  - Задачи могут учиться с разной скоростью
  - Получается слишком сильная регуляризация (регулируем гиперпараметры)
  - Большой угол между градиентами
- Недостаточная выразительность модели - обычно многозадачные модели значительно крупнее, чем однозадачные и требуется **усложнять гипотезы голов**

Проблема отличающихся целей



Yu et al. Gradient Surgery for Multi-Task Learning. 2020

Решение

Algorithm 1 PCGrad Update Rule

Require: Model parameters θ, task minibatch $\mathcal{B} = \{\mathcal{T}_k\}$

$\mathbf{g}_k \leftarrow \nabla_\theta \mathcal{L}_k(\theta) \ \forall k$

$\mathbf{g}_k^{\text{PC}} \leftarrow \mathbf{g}_k \ \forall k$

for $\mathcal{T}_i \in \mathcal{B}$ **do**

  for $\mathcal{T}_j \overset{\text{uniformly}}{\sim} \mathcal{B} \setminus \mathcal{T}_i$ in random order **do**

    if $\mathbf{g}_i^{\text{PC}} \cdot \mathbf{g}_j < 0$ **then**

      // Subtract the projection of $\mathbf{g}_i^{\text{PC}}$ *onto* $\mathbf{g}_j$

      Set $\mathbf{g}_i^{\text{PC}} = \mathbf{g}_i^{\text{PC}} - \frac{\mathbf{g}_i^{\text{PC}} \cdot \mathbf{g}_j}{\|\mathbf{g}_j\|^2} \mathbf{g}_j$

return update $\Delta\theta = \mathbf{g}^{\text{PC}} = \sum_i \mathbf{g}_i^{\text{PC}}$

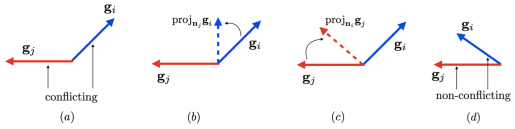


Figure 2: Conflicting gradients and PCGrad. In (a), tasks i and j have conflicting gradient directions, which can lead to destructive interference. In (b) and (c), we illustrate the PCGrad algorithm in the case where gradients are conflicting. PCGrad projects task i's gradient onto the normal vector of task j's gradient, and vice versa. Non-conflicting task gradients (d) are not altered under PCGrad, allowing for constructive interaction.

Yu et al. Gradient Surgery for Multi-Task Learning. 2020

Гипотеза 1: стандартная

- Рассмотрим задачу i-ую классификации последовательности $T_i = \{p_i(x), p_i(y|x), H_i, L_i\}$, где $p_i(x), p_i(y|x)$ - распред. входов, меток
- Функция потерь $L_i(p, y) = -\sum_c^{C_i} \delta_{c,y} \log p_c$ (кросс-энтропия)
- Зафиксируем гипотезу для общих слоёв E - стек энкодеров Трансформера
- $\dim E$ - размерность выходных векторов; $C_i = 1, 2, ..., K_i, K_i$ - число классов
- Прямой проход по нейронной сети для задачи i : $F_i(\text{seq}) = H_i \circ E_{\text{CLS}} \circ \text{seq}$

Гипотеза

$H_i^1 = softmax \circ linear_i$

- $\text{linear}_i(x) = W_i[1; x]; \text{linear}_i : R^{dimE} \to R^{K_i}$
- $\text{softmax}(x)_i = \frac{\exp(x_i)}{\sum_{k=1}^{K_i} \exp(x_k)}; \text{softmax} : R^M \to R^M$

Гипотеза 2: стек линейных слоёв

- Рассмотрим задачу i-ую классификации последовательности $T_i = \{p_i(x), p_i(y|x), H_i, L_i\}$, где $p_i(x), p_i(y|x)$ - распред. входов, меток
- Функция потерь $L_i(p, y) = -\sum_c^{C_i} \delta_{c,y} \log p_c$ (кросс-энтропия)
- Зафиксируем гипотезу для общих слоёв E - стек энкодеров Трансформера
- $\dim E$ - размерность выходных векторов; $C_i = 1, 2, ..., K_i, K_i$ - число классов
- Прямой проход по нейронной сети для задачи i : $F_i(\text{seq}) = H_i \circ E_{\text{CLS}} \circ \text{seq}$

Гипотеза

$H_i^2 = softmax \circ linear_{i,L} \circ ... \circ relu \circ linear_{i,2} \circ relu \circ linear_{i,1}$

- $\text{linear}_{i,j}(x) = W_{i,j}[1; x]$
- $\text{linear}_{i,1} : R^{\dim E} \to R^d$
- $\text{linear}_{i,l} : R^d \to R^d \ \forall l = \overline{2, (L-1)}$
- $\text{linear}_{i,L} : R^d \to R^{K_i}$
- $\text{softmax}(x)_i = \frac{\exp(x_i)}{\sum_{k=1}^{K_i} \exp(x_k)}$; $\text{softmax} : R^M \to R^M$

Гипотеза 3: накинем вниманий

- Рассмотрим задачу i-ую классификации последовательности $T_i = \{p_i(x), p_i(y|x), H_i, L_i\}$, где $p_i(x), p_i(y|x)$ - распред. входов, меток
- Функция потерь $L_i(p, y) = -\sum_c^{C_i} \delta_{c,y} \log p_c$ (кросс-энтропия)
- Зафиксируем гипотезу для общих слоёв E - стек энкодеров Трансформера
- $\dim E$ - размерность выходных векторов; $C_i = 1, 2, ..., K_i$, K_i - число классов
- Прямой проход по нейронной сети для задачи i : $F_i(\text{seq}) = H_i \circ E_{\text{CLS}} \circ \text{seq}$

Гипотеза

$H_i^3 = H_i^h \circ \text{subEncoder}_i$

- $subEncoder_i = \text{MHSA}_{i,M} \circ ... \circ \text{MHSA}_{i,2} \circ \text{MHSA}_{i,1}$
- $\text{MHSA}_{i,m} = \text{concat}(\text{head}_1^{(i)}(X), ..., \text{head}_h^{(i)}(X))W_O^{(i)}$
- $\text{head}^{(i)}(X) = \text{softmax}\left(\frac{Q(X)K(X)^T}{\sqrt{d_h}}\right)V(X)$
- $Q(X) = XW_Q^{(i)}, K(X) = XW_K^{(i)}, V(X) = XW_V^{(i)}$

Что успел сделать по этому пункту

- Первая гипотеза точно работает, с ней были основные эксперименты на данный момент
- Первая гипотеза начинает плохо работать, если много задач / сложные задачи
- $\Rightarrow$ первая гипотеза не достаточно выразительна
- Вторая гипотеза работает (сходится)
- Вторая гипотеза работает не хуже первой
- Третья гипотеза нормально работала в однозадачной модели
- Продолжаю активно тестировать данные гипотезы

Текущая таблица лидеров

Rank	Name	Team	Link	Score	LiDiRus	RCB	PARus	MuSeRC	TERRa	RUSSE	RWSD	DaNetQA	RuCoS
1	HUMAN BENCHMARK	AGI NLP	i	**0.811**	0.626	0.68 / 0.702	0.982	0.806 / 0.42	0.92	0.805	0.84	0.915	0.93 / 0.89
2	Golden Transformer v2.0	Avengers Ensemble	i	**0.755**	0.515	0.384 / 0.534	0.906	0.936 / 0.804	0.877	0.687	0.643	0.911	0.92 / 0.924
3	YaLM p-tune (3.3B frozen + 40k trainable params)	Yandex	i	**0.711**	0.364	0.357 / 0.479	0.834	0.892 / 0.707	0.841	0.71	0.669	0.85	0.92 / 0.916
4	ruT5-large finetune	SberDevices	i	**0.686**	0.32	0.45 / 0.532	0.764	0.855 / 0.608	0.775	0.773	0.669	0.79	0.86 / 0.859
5	ruRoberta-large finetune	SberDevices	i	**0.684**	0.343	0.357 / 0.518	0.722	0.861 / 0.63	0.801	0.748	0.669	0.82	0.87 / 0.867
6	Golden Transformer v1.0	Avengers Ensemble	i	**0.679**	0.0	0.406 / 0.546	0.908	0.941 / 0.819	0.871	0.587	0.545	0.917	0.92 / 0.924
7	ruT5-base finetune	Sberdevices	i	**0.635**	0.267	0.423 / 0.461	0.636	0.808 / 0.475	0.736	0.707	0.669	0.769	0.85 / 0.847
8	ruBert-large finetune	SberDevices	i	**0.62**	0.235	0.356 / 0.5	0.656	0.778 / 0.436	0.704	0.707	0.669	0.773	0.81 / 0.805
9	ruBert-base finetune	SberDevices	i	**0.578**	0.224	0.333 / 0.509	0.476	0.742 / 0.399	0.703	0.706	0.669	0.712	0.74 / 0.716
10	YaLM 1.0B few-shot	Yandex	i	**0.577**	0.124	0.408 / 0.447	0.766	0.673 / 0.364	0.605	0.587	0.669	0.637	0.86 / 0.859
11	RuGPT3XL few-shot	SberDevices	i	**0.535**	0.096	0.302 / 0.418	0.676	0.74 / 0.546	0.573	0.565	0.649	0.59	0.67 / 0.665
12	RuBERT plain	DeepPavlov	i	**0.521**	0.191	0.367 / 0.463	0.574	0.711 / 0.324	0.642	0.726	0.669	0.639	0.32 / 0.314

Материалы / источники

- Стэнфордский курс CS 330: Deep Multi-Task and Meta Learning
- An Overview of Multi-Task Learning in Deep Neural Networks
- Yu et al. Gradient Surgery for Multi-Task Learning. 2020
- A Survey on Negative Transfer. 2021