

LLM综述

xbZhong

2025-08-20

[本页PDF](#)

大模型训练过程

1. 预训练

- 目标：学会语言本身，语言的通用表示，进行语言建模
- 方法：自监督学习

2. SFT（有监督微调）：何使用标注数据对预训练模型进行监督训练的过程

- 目标：让模型遵循指令，能够理解人类提出的问题
- 方法：监督学习
- 通常有全参微调，LoRA微调，Adapter微调等，**指令微调**也是SFT的一部分

3. RLHF（人类反馈强化学习）

- 目标：让模型更符合人类的偏好，贴近人类意图
- 方法：强化学习

4. 增强与扩展

- 蒸馏，微调，迁移学习等

SFT（Supervised Finetune）

主要任务是数据收集与标注，**标注数据的质量和数量对微调效果至关重要**

数据生产工作不完全是dirty work，**数据质量直接决定**模型微调后性能的好坏

数据方面有以下几点要阐述的

- **Few-Shot Prompting** 是一种通过提供少量示例（通常1-5个）来引导模型生成符合任务要求的输出的技术
- **Seed Prompt** 是为特定任务类型（task_type）预先设计的指令模板，用于**明确任务目标、输入输出格式及上下文约束**
- 数据多样性
 - 数据质量和多样性比数据数量更为重要
 - answer是尽量不要出错，需要大量人工筛查
 - task_type 的划分就是sft数据最重要的**基建工作**，没有之一
- 数据生产
 - 生产prompt
 - 给每个task_type（任务类型分类）准备一些seed prompt，然后随机采样seed，喂给一个很强的**pretrain**模型，让他基于这些**seed**再续写出一些问题或者**prompt**
 - 生产answer
 - 不在乎成本，用GPT4/Claude3
 - 在乎成本，Qwen_72B/deepseek_MoE

引人深思的一段话

模型的上线并不代表着 SFT 工作的结束，它反倒代表着 SFT 真正工作的开始。只有到了这一刻，我们才开始接触“最真实的用户 prompt”。

image-20250817002125325

RL (Reinforcement Learning)

定义：基于智能体在复杂、不确定的环境中最大化他能获得的奖励，从而获得自主决策

核心目标：给定一个马尔可夫决策过程，寻找最优策略

经典的强化学习模型

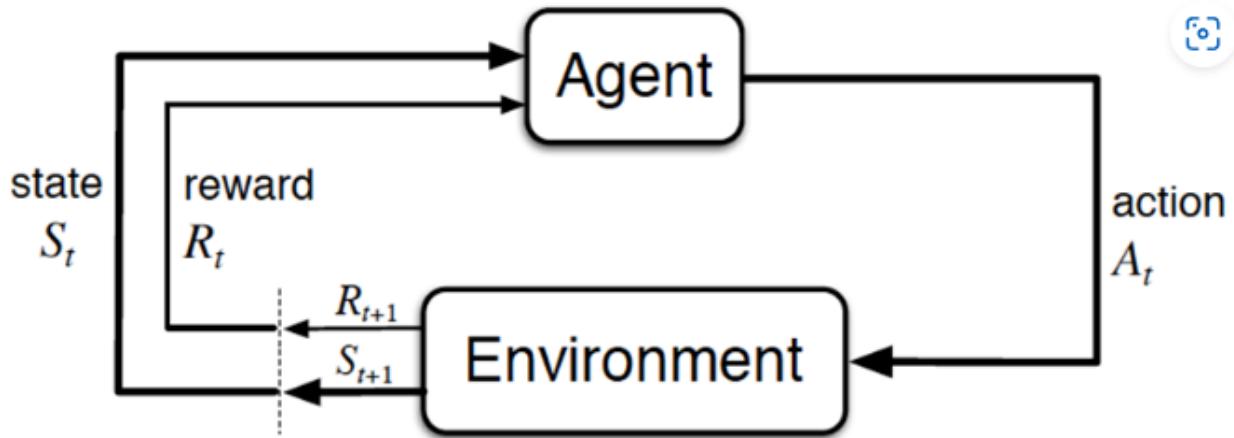


image-20250817115944207

- **Agent**: 智能体，就是我们要训练的模型
- **action**: 行为
- **Environment**: 环境，是提供reward的某个对象
- **reward**: 奖赏，可以类比为在明确目标的情况下，接近目标意味着奖，远离目标意味着做的不好则惩，最终达到**奖励最大化**
- **State**: 环境的状态

马尔可夫决策过程 (MDP)

状态转移矩阵

假设有一类不确定的现象，假设今天是晴天，但无法百分百确定明天一定是晴天还是雨天、阴天

对于这种假设具有M个状态的模型

1. 共有 M^2 的状态转移，因为任何一个状态都有可能是所有状态的下一个转移状态
2. 每一个状态转移都有一个概率值，相当于从一个状态转移到另一个状态的概率
3. 所有 M^2 个概率可以用一个状态转移矩阵表示

$$\begin{array}{c}
 & \text{Today} \\
 \begin{matrix} & \text{sun} & \text{cloud} & \text{rain} \\ \text{Yesterday} & \begin{matrix} \text{sun} \\ \text{cloud} \\ \text{rain} \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0.50 & 0.375 & 0.125 \\ 0.25 & 0.125 & 0.625 \\ 0.25 & 0.375 & 0.375 \end{bmatrix} \end{array}$$

image-20250817120703506

概率论的研究对象是静态的随机现象，而随机过程的研究对象是随时间演变的随机现象

- 随机现象在某时刻t的取值是一个向量随机变量，用 S_t 表示 比如上述天气转移矩阵便如下所示

$$\begin{bmatrix} S_1 \rightarrow S_1 & S_1 \rightarrow S_2 & S_1 \rightarrow S_3 \\ S_2 \rightarrow S_1 & S_2 \rightarrow S_2 & S_2 \rightarrow S_3 \\ S_3 \rightarrow S_1 & S_3 \rightarrow S_2 & S_3 \rightarrow S_3 \end{bmatrix}$$

- 在某个时刻t的状态 S_t 通常取决于t时刻之前的状态，将已知历史信息 (S_1, \dots, S_t) 时下一个时刻的状态 S_{t+1} 的概率表示成 $p(S_{t+1}|S_1, \dots, S_t)$
- 当且仅当某时刻的状态只取决于上一时刻的状态时，一个随机过程被称为具有马尔可夫性质

$$p(S_{t+1}|S_t) = p(S_{t+1}|S_1, \dots, S_t)$$

- 具有马尔可夫性质的随机过程称为马尔可夫过程

- 是一个二元组 $\langle S, P \rangle$ ， S 是有限状态集， P 是状态转移矩阵

$$P_{ss'} = p(S_{t+1} = s' | S_t = s)$$

马尔可夫奖励过程 (MRP)

是一个四元组 $\langle S, P, R, \gamma \rangle$

- S : 有限状态集
- P : 状态转移概率矩阵
- R : 奖励函数 $R_S = E[R_{t+1}|S_t = s]$
 - 也就是状态转移概率加权和
 - 表示从状态 s 到状态 s' 的收益
 - 取均值是因为状态 s' 并非固定，从 s 到下一个状态有多种可能，要取这多种可能的均值
- γ : 折扣因子/衰减系数 $\gamma \in [0, 1]$
- 回报 (Return) : G_t 是从时间t开始的总折扣奖励
 - 表示所有奖励在当前的价值，量化一个策略的长期表现
 - 设置衰减系数的原因：保证回报的收敛

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}$$

- 值函数： $V(s)$ 表示一个状态 s 的长期价值
 - 是对回报的期望
 - 状态 s 后面的状态都是未知的，也就是有多个状态路径可以选择，**值函数就是对这多个状态路径的回报取了均值**

$$V(s) = E[G_t | S_t = s]$$

MRPs的贝尔曼方程

由下述式子可以推出

$$V(s) = E[G_t | S_t = s] G_t = R_{t+1} + \underbrace{\gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots}_{\gamma V(S_{t+1})} = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}$$

也就是

$$V(s) = E[R_{t+1} + \gamma V(S_{t+1}) | S_t = s]$$

马尔可夫决策过程 (MDP)

马尔可夫决策过程是一个五元组 $\langle S, A, P, R, \gamma \rangle$

- S : 有限状态集
- A : 动作集
- P : 状态转移概率矩阵 $P_{ss'}^a = p[S_{t+1} = s' | S_t = s, A_t = a]$
- R : 奖励函数 $R_S^a = E[R_{t+1} | S_t = s, A_t = a]$
 - 也就是**状态转移概率加权和**
 - 表示从状态 s 执行动作 a 到状态 s' 的收益
 - 取均值是因为状态 s' 并非固定，从 s 到下一个状态有多种可能，要**取这多种可能的均值**
- γ : 折扣因子/衰减系数 $\gamma \in [0, 1]$

策略

π 是给定状态的**动作分布**， $\pi(a|s) = P[A_t = a | S_t = s]$

- 是一个**随机变量**，表示在状态 s 前提下作出动作 a 的可能性
- 完全决定智能体行为
- MDP策略依赖于当前状态（无关历史），且无关时间

给定一个**马尔可夫决策过程** $M = \langle S, A, P, R, \gamma \rangle$ 和策略 π ，其可转化为**马尔可夫过程**和**马尔可夫奖励过程**

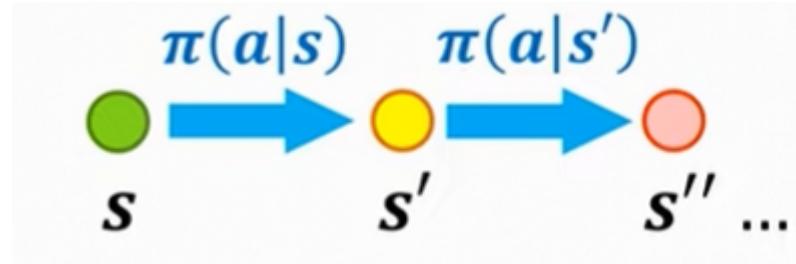
- 也就是通过加权求和把**动作的维度消除**，减少运算量

$$P_{s,s'}^\pi = \sum_{a \in A} \pi(a|s) P_{s,s'}^a R_s^\pi = \sum_{a \in A} \pi(a|s) R_s^a$$

- 第一个可以理解成从状态 s 可以**使用多个动作到状态 s'** ，这里对其**使用了加权求和**
- 第二个也同理，加权求和，消除动作的维度

状态值函数

表示在状态s下，遵循策略 π 的期望回报



$$V_\pi(s) = E_\pi[G_t | S_t = s]$$

回报的表达式

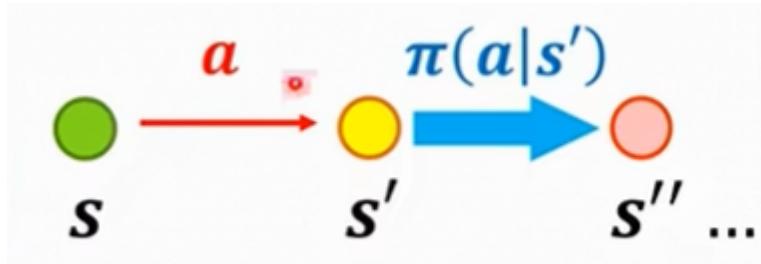
$$G_t = \underbrace{R_{t+1}}_{\text{立即奖励}} + \underbrace{\gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots}_{\text{后继状态的折扣价值}} = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}$$

可以得到状态值函数的贝尔曼期望方程

$$V_\pi(s) = E_\pi[R_{t+1} + \gamma V_\pi(S_{t+1}) | S_t = s]$$

动作值函数

表示在状态s下执行动作a后，遵循策略 π 的期望回报



$$q_\pi(s, a) = E_\pi[G_t | S_t = s, A_t = a]$$

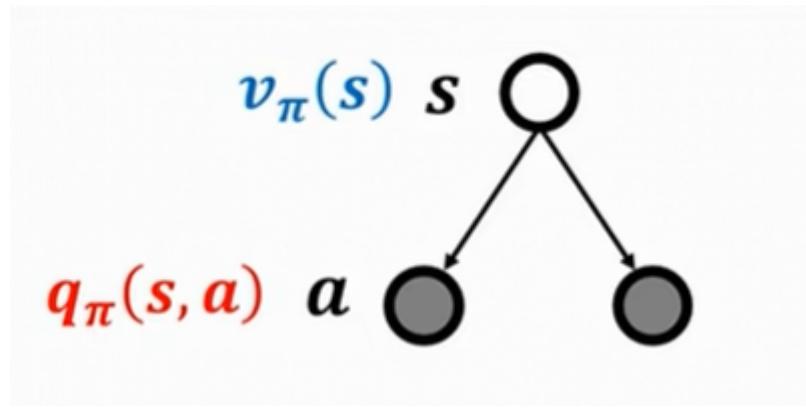
同上推导，可以得到动作值函数的贝尔曼期望方程

$$q_\pi(s, a) = E_\pi[R_{t+1} + \gamma q_\pi(S_{t+1}, A_{t+1}) | S_t = s, A_t = a]$$

将动作值函数和状态值函数联系起来

某一个状态的价值可以用该状态下的所有动作的价值表述

$$V_\pi(s) = \sum_{a \in A} \pi(a|s) q_\pi(s, a)$$



某一个动作的价值可以用该状态后继状态的价值表述

$$q_\pi(s, a) = R_s^a + \gamma \sum_{s' \in S} P_{ss'}^a V_\pi(s')$$

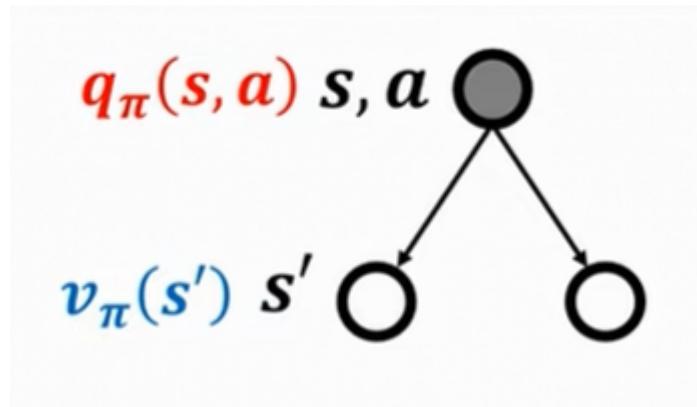


image-20250817181417147

贝尔曼最优方程

最优状态值函数

$$V_*(s) = \max_{\pi} V_{\pi}(s)$$

最优动作值函数

$$q_*(s, a) = \max_{\pi} q_{\pi}(s, a)$$

最优策略

- 存在一个最优策略，使 $\pi_* \geq \text{any } \pi$
- 所有最优策略都能取得**最优状态值函数**
- 所有最优策略都能取得**最优动作值函数**
- 最优策略本质上是一个**具体的动作链**，而不是分布

$$\pi_* \geq \text{any } \pi$$

注：若 $V_{\pi'}(s) \geq V_{\pi}(s)$ ，则 $\pi' > \pi$

由上述定义可以写出**贝尔曼最优方程**

状态值函数的贝尔曼最优方程

首先根据

$$V_\pi(s) = \sum_{a \in A} \pi(a|s) q_\pi(s, a)$$

和

$$q_\pi(s, a) = R_s^a + \gamma \sum_{s' \in S} P_{ss'}^a V_\pi(s')$$

写出：

$$V_\pi(s) = \sum_{a \in A} \pi(a|s) (R_s^a + \gamma \sum_{s' \in S} P_{ss'}^a V_\pi(s'))$$

下面来推导贝尔曼最优方程（动态规划方法）

从状态值函数的贝尔曼方程出发

$$V_\pi(s) = \sum_{a \in A} \pi(a|s) q_\pi(s, a)$$

最优策略 π_* 必须在每个状态 s 选择最大化 $q_*(s, a)$

- 最优策略 π_* 一定满足 $V_{\pi_*}(s) \geq V_\pi(s)$
- 也满足 $q_{\pi_*}(s, a) \geq q_\pi(s, a)$
- 最大化 $V_\pi(s)$ 等价于最大化 $q_\pi(s, a)$

$$\pi_*(a | s) = \begin{cases} 1 & \text{if } a = \arg \max_a q_*(s, a), \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

因此，最优状态值需要满足：

$$V_*(s) = \max_a q_*(s, a)$$

代入动作值函数

$$q_*(s, a) = R_s^a + \gamma \sum_{s'} P_{s,s'}^a V_*(s')$$

最后得出状态值函数的贝尔曼最优方程

$$V_*(s) = \max_a (R_s^a + \gamma \sum_{s'} P_{s,s'}^a V_*(s'))$$

动作值函数的贝尔曼最优方程

同上，写出：

$$q_\pi(s, a) = R_s^a + \gamma \sum_{s' \in S} P_{ss'}^a V_\pi(s')$$

要最大化动作值函数的贝尔曼方程，就是要最大化 V_π ，即

$$q_*(s, a) = R_s^a + \gamma \sum_{s' \in S} P_{ss'}^a V_*(s')$$

代入 $V_*(s')$ ，得到**动作值函数的贝尔曼最优方程**

$$q_*(s, a) = R_s^a + \gamma \sum_{s' \in S} P_{ss'}^a \max_{a'} q_*(s', a')$$

LLaMA

与GPT类似，LLaMA也**只使用了Transformer的解码器**，即Decoder-only架构，且目前主流的语言大模型都采用了这个架构

- 只训练了单一模块，效率高
- 采用**掩码注意力实现双向编码和单向生成的兼容**
- **自回归任务天生适应**

RMSNorm

通过计算输入的张量的均方根实现归一化

公式如下

$$RMSNorm(x) = \frac{x}{\sqrt{\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d x_i^2 + \epsilon}} \cdot \gamma$$

其中：

- x 是输入向量
- d 是输入向量的维度
- ϵ 是一个小常数，避免除零错误
- γ 是一个可学习的缩放参数

SwiGLU

是一种用于神经网络的激活函数，结合了Swish激活函数和门控机制的特点

Swish激活函数

$$Swish(x) = x \cdot \sigma(x)$$

- σ 为Sigmoid函数

GLU激活函数

$$GLU(x) = \sigma(W_1x + b_1) \odot (W_2x + b_2)$$

- \odot 为逐元素相乘
- W_1 、 W_2 为权重矩阵， b_1 、 b_2 为偏置项

SwiGLU激活函数

$$SwiGLU(x) = Swish(Linear_1(x)) \odot Linear_2(x)$$

符号寓意同上

优势：

- 平滑非线性：Swish函数的平滑性可以缓解梯度消失
- 门控特性：GLU的门控机制允许模型动态调整信息流

RoPE

提过，不说了，在[其它笔记](#)里有

GQA

在LLaMA2、3中使用

具体理论在下面

GPT

Deepseek

MLA (多头潜在注意力)

下面说了，不再赘述

分布式训练

为何要进行分布式训练？

- 模型太过庞大，一个GPU放不下
- 用多张GPU加速模型训练

有哪些分布式训练框架？

- DP (Data Parallel)
- DDP (Distributed Data Parallel)
- FSDP (Fully Sharded Data Parallel)

All-Reduce (全局制约)

- 目标：所有进程（GPU）都得到相同结果，该结果是所有进程输入数据的聚合
- 操作流程
 - 输入：每个GPU有一个本地数据
 - 数据交换：对所有GPU的数据执行某种操作（如 SUM、MAX）
 - 输出：所有GPU得到完全相同的聚合结果

All-Gather (全局收集)

- 目标：所有进程（GPU）收集其它所有进程的数据，最终每个GPU拥有完整的数据拼接（不聚合）
- 操作流程
 - 输入：每个GPU有一个本地数据块
 - 数据交换：所有GPU互相广播自己的数据块

- 输出：所有GPU得到所有数据块的完整拼接

数据并行

DP (Data Parallel)

单进程多线程，Python GIL（全局解释器锁）只能利用一个CPU核

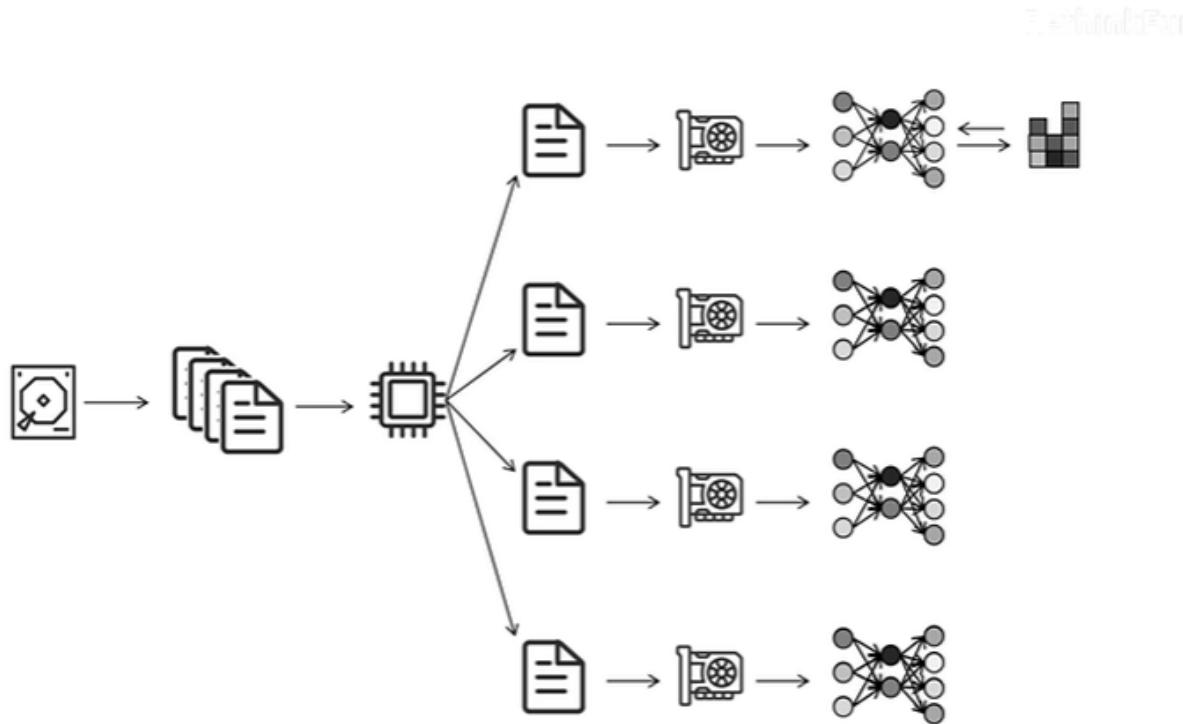


image-20250814165126760

工作流程

- 用CPU将数据分成多份，给每个GPU一份
- 每个GPU独自进行训练，将自己计算的梯度传递到GPU0上
- GPU0用全局平均梯度更新自己的网络参数
- 将更新后的参数广播到其它GPU上

通信分析

假设参数量位 ψ ，节点数为 N

- 对于GPU0，传入梯度为 $(N - 1)\psi$ ，传出参数为 $(N - 1)\psi$
- 对于其它GPU，传出梯度为 ψ ，传入参数为 ψ

问题

- 单进程，多线程，Python GIL只能利用一个CPU核
- GPU0负责收集梯度，更新参数，广播参数，计算压力大

DDP (Distributed Data Parallel)

生产环境常用，多进程多线程

- 执行多个相同的py脚本，但用rank进行不同脚本的区分，也就实现了多进程
- 注意的是通讯成本比计算成本大

工作步骤

- GPU0加载模型，并把模型同步到其它GPU
- 按照神经网络参数定义**反序**，把参数进行排列，即**输出层在最前面，输入层在最后面**
- 对每个参数**注册一个监听器**，将这些监听器**按顺序**放到一个个桶里
- GPU在进行**计算的同时进行传输**，先计算出来的梯度先进行同步
- **当多个GPU的同一个桶的梯度都计算完成后，就进行Ring-AllReduce的梯度同步**
- 所有的桶都计算完毕后，每个GPU调用**他们各自的优化器**进行参数更新

通讯分析

假设参数量位 ψ ，进程数为 N

对于每个GPU进程

- Scatter-Reduce阶段传入/传出： $(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx \psi$
- All-Gather阶段传入/传出： $(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx \psi$

总传入/传出： 2ψ ，与集群大小无关

集群通信方式：Ring-AllReduce

- 将多个节点连成环进行通讯
- 具体就是每个GPU即在发送，也在接受数据
- 参数量除以总GPU个数就是一个**GPU负责的块**（也就是要同步的块）

工作流程：

Scatter-Reduce

- 假设有n块GPU，那么将数据划分为n块，然后开始执行n-1次操作
- 第*i*次操作， GPU_j 会将自己的第 $(j - i)\%n$ 块数据发送给 GPU_{j+1} ，并接收 GPU_{j-1} 的第 $(j - i - 1)\%n$ 块数据

All-gather

- 将各个参数梯度求和值同步到其它GPU
- 第*i*块GPU的第 $(i + 1)\%n$ 块数据传递给其它GPU
- 在第*i*次传递时， GPU_j 把自己的第 $(j - i - 1)\%n$ 块数据发送给自己的右邻居，同时接受左邻居的第 $(j - i - 2)\%n$ 块数据

Ring-AllReduce

来自哔哩哔哩

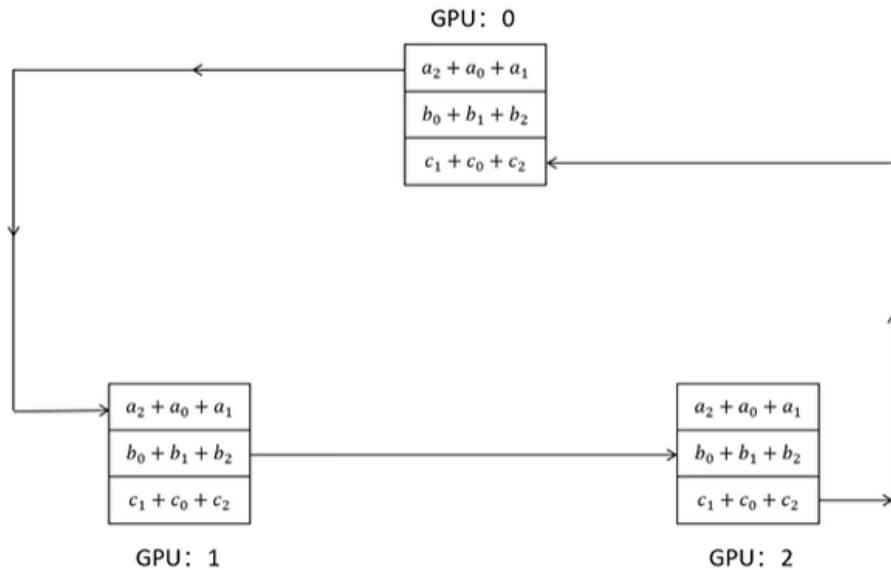


image-20250813101824156

FSDP (Fully Sharded Data Parallel)

核心原理：

- 参数分片：对梯度、参数、优化器状态均匀拆分到各个GPU
- 按需通信：前向传播或者后向传播的时候依靠通信获取所需数据，使用完后立即释放
- 显存卸载：会将没用到的优化器状态或者参数从GPU显存卸载到CPU内存

DeepSpeed ZeRO-1

假设有3块GPU，使用混合精度训练，每个GPU都要存储以下东西



image-20250814170149855

在GPU中，优化器状态占用大部分显存，ZeRO-1的出发点就是每块GPU只存储一部分优化器状态，存储了那部分优化器的状态就负责那几层网络的参数更新

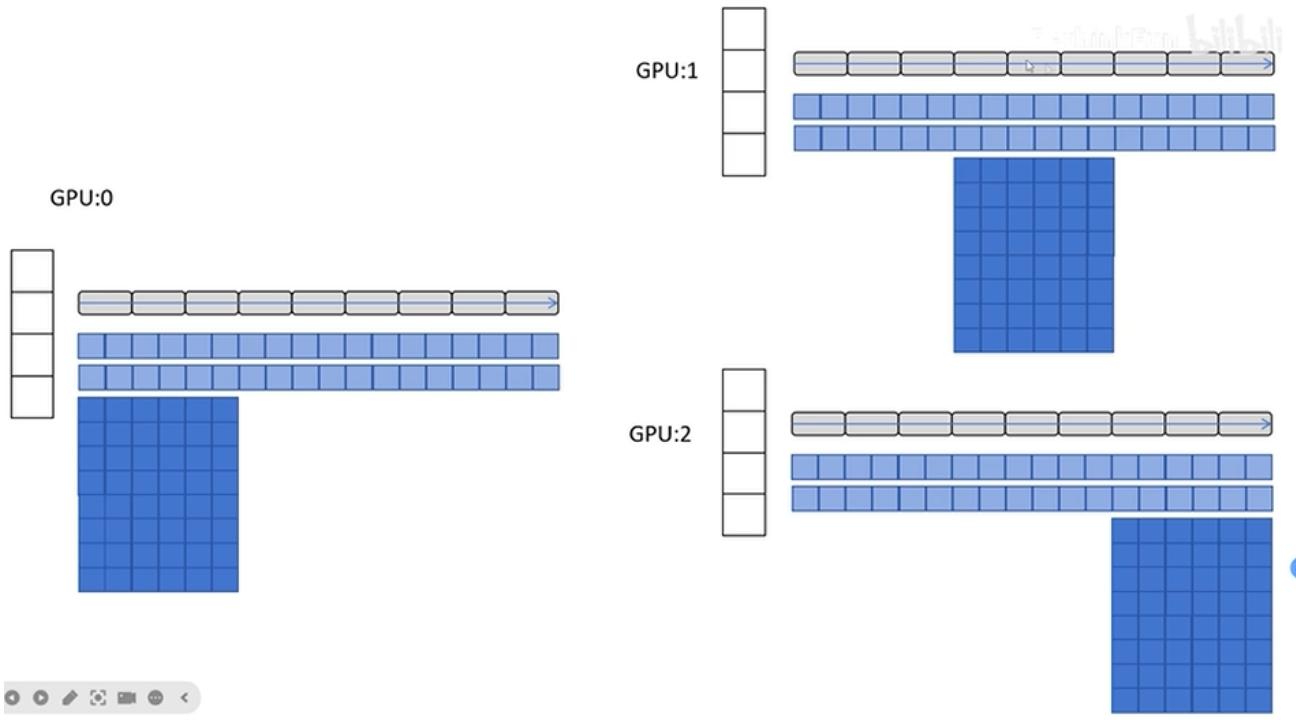


image-20250814170444276

工作流程

- 进行前向传播
- 进行后向传播的同时，GPU0和GPU1把计算出来的梯度传给GPU2，让GPU2去更新网络参数，其它GPU同理
- 反向传播完毕后，每个GPU更新各自优化器的梯度、一阶动量、二阶动量、FP32参数和FP16网络参数、梯度
- 最后把FP16参数广播到每个GPU完成一次训练

通信量分析

假设参数量位 ψ ，节点数为 N

对于每个GPU进程：

- 梯度收集阶段传入/传出： $(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx \psi$
- 参数广播阶段传入/传出： $(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx \psi$

总传入/传出： 2ψ

DeepSpeed ZeRO-2

ZeRO-2中，把FP16的梯度也进行了划分，即GPU不再保存自己用不到的梯度

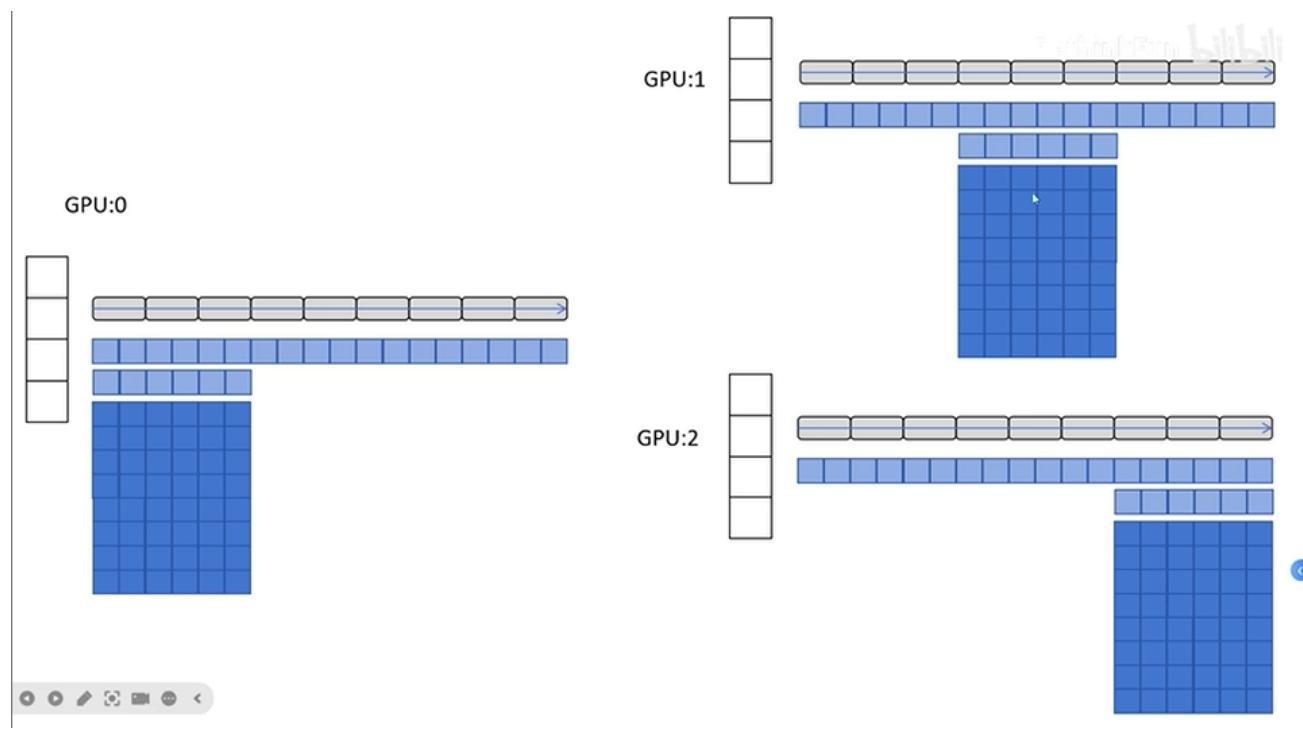


image-20250814171201197

工作过程

- 进行前向传播
- 进行后向传播时，**GPU0和GPU1计算出来梯度后，立即传递给GPU2**，然后进行释放，其它GPU也同理
- 反向传播完毕后，每个GPU更新各自优化器的梯度、一阶动量、二阶动量、FP32参数和FP16网络参数、梯度
- 最后把FP16参数广播到每个GPU完成一次训练

通信量分析

假设参数量位 ψ ，节点数为 N

对于每个GPU进程：

- 梯度收集阶段传入/传出： $(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx \psi$
- 参数广播阶段传入/传出： $(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx \psi$

总传入/传出： 2ψ

DeepSpeed ZeRO-3

ZeRO-3对FP16参数也进行了划分

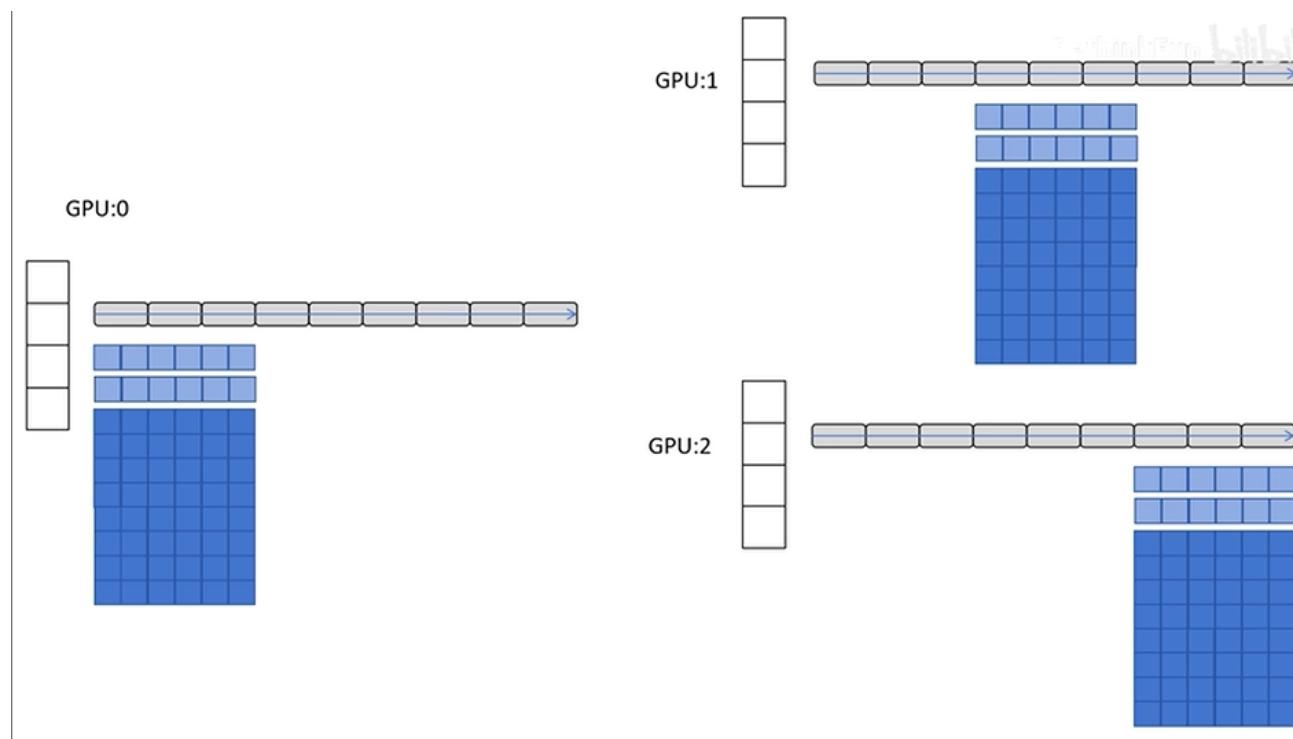


image-20250814172727460

工作过程

- 前向传播，GPU遇到自己没有的参数，靠**其它GPU来进行广播**，计算完后立即释放，不占用显存
- 反向传播同样要用到参数，这时候需要利用广播获取参数，**使用完参数后立即释放**
- 每个GPU利用优化器进行参数更新，每个GPU仅更新自己分区的参数
- 最后把**参数进行广播**，完成一次训练

通信量分析

假设参数量位 ψ ，节点数为 N

对于每个GPU进程：

- 梯度收集阶段传入/传出： $(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx \psi$
- 参数广播阶段传入/传出： $2(N - 1)\frac{\psi}{N} \approx 2\psi$

总传入/传出： 3ψ

模型并行

张量并行 (TP)

核心原理：将模型中的张量进行拆分然后分配到不同的GPU上

列并行

将权重矩阵按列进行切分

假设有

$$Y = XW$$

其中：

- $X \in R^{2 \times 2}$, $W \in R^{2 \times 2}$

可以看成

$$\begin{bmatrix} y_1 & y_2 \\ y_3 & y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 & w_2 \\ w_3 & w_4 \end{bmatrix}$$

然后按列进行分割，分配到两块GPU上进行计算

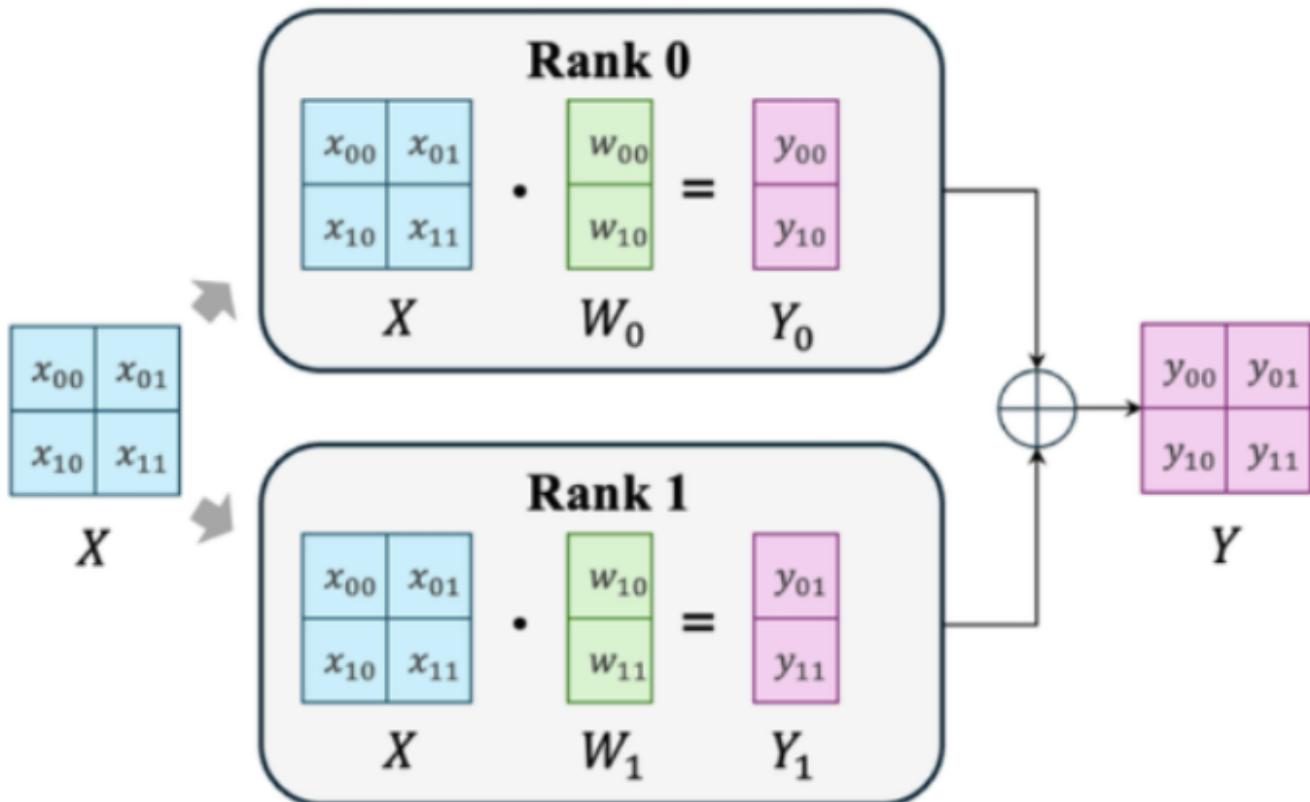
$$W = [W_0 \quad W_1]$$

接着

$$Y_0 = XW_0 = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_3 \end{bmatrix} Y_1 = XW_1 = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_2 \\ w_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_2 \\ y_4 \end{bmatrix}$$

然后进行拼接

$$Y = [Y_0 \quad Y_1]$$



$$W = [W_0 \quad W_1], Y = [Y_0 \quad Y_1]$$

(b) 列并行

行并行

将权重矩阵按行进行切分

假设有

$$Y = XW$$



其中：

- $X \in R^{2 \times 2}$, $W \in R^{2 \times 2}$

可以看成

$$\begin{bmatrix} y_1 & y_2 \\ y_3 & y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 & w_2 \\ w_3 & w_4 \end{bmatrix}$$

然后按列进行分割，分配到两块GPU上进行计算

$$W = \begin{bmatrix} W_0 \\ W_1 \end{bmatrix}$$

此时 X 也要进行切割

$$X = [X_1 \quad X_2]$$

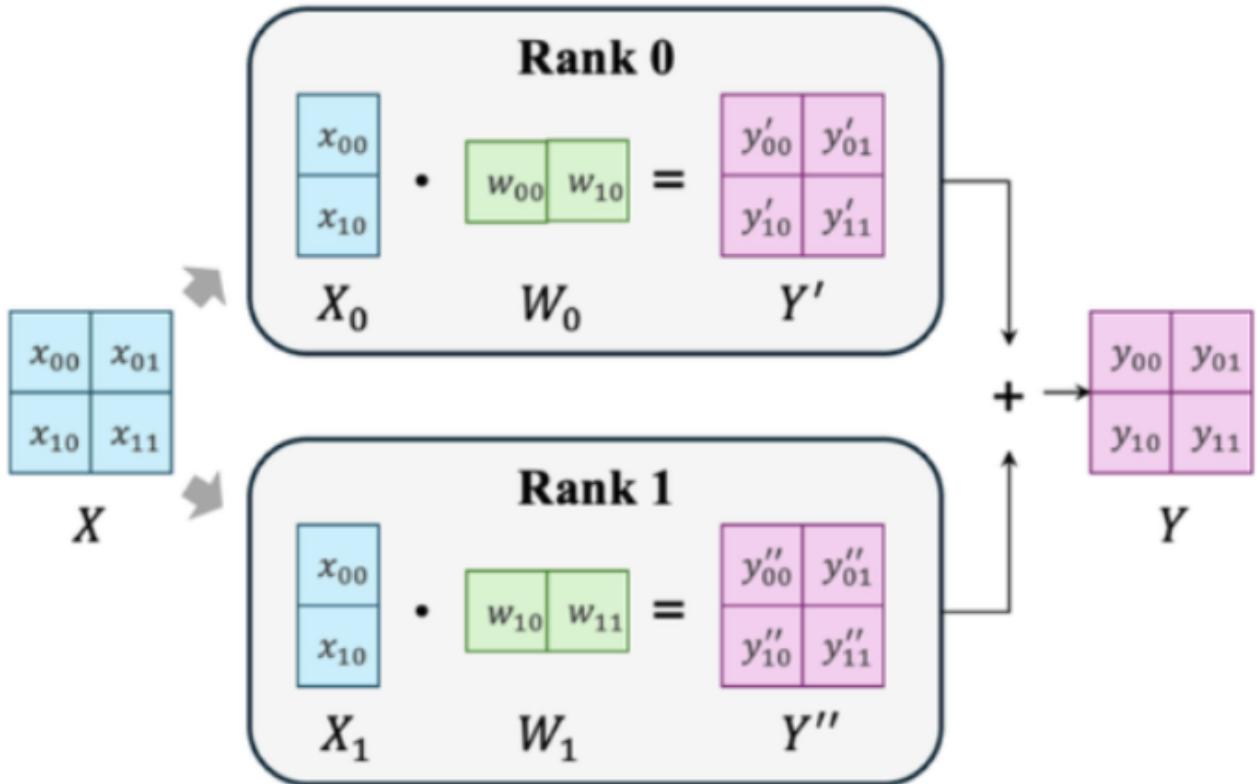
接着进行计算

$$Y_1 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_3 \end{bmatrix} [w_1 \quad w_2] = \begin{bmatrix} y_{11} & y_{12} \\ y_{31} & y_{32} \end{bmatrix} Y_2 = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_4 \end{bmatrix} [w_3 \quad w_4] = \begin{bmatrix} y_{23} & y_{24} \\ y_{43} & y_{44} \end{bmatrix}$$

最后把 Y_1 和 Y_2 进行相加得到最终输出

$$Y = Y_1 + Y_2$$





$$X = [X_0 \ X_1], W = [W_0 \ W_1]^T, Y = Y' + Y''$$

(c) 行并行

CSDN @舒克与贝克

流水线并行 (PP)

本质上是层间并行，将模型的不同层分发到不同的GPU上

朴素流水线并行

- 将模型按照层间切分成多个部分 (Stage)，并将每个部分 (Stage) 分配给一个 GPU
- 对小批量数据进行常规的训练，在模型切分成多个部分的边界处进行通信

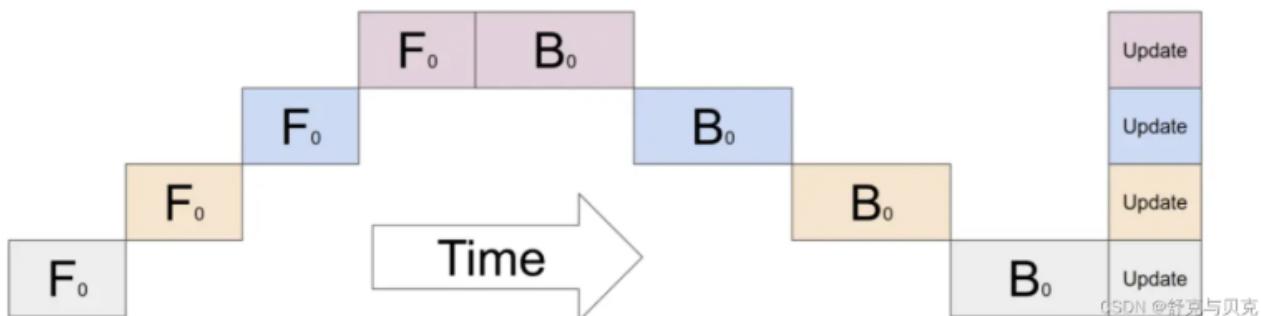


image-20250815223849142

工作流程

- 模型进行前向传播，到边界处把结果张量传递给GPU2
- GPU2计算得到模型的输出
- 进行反向传播，反向传播至边界处将梯度发送给GPU1，GPU1继续进行反向传播

存在的问题

- GPU利用率低，在任意时刻只有一个GPU工作
- 计算和通信没有重叠

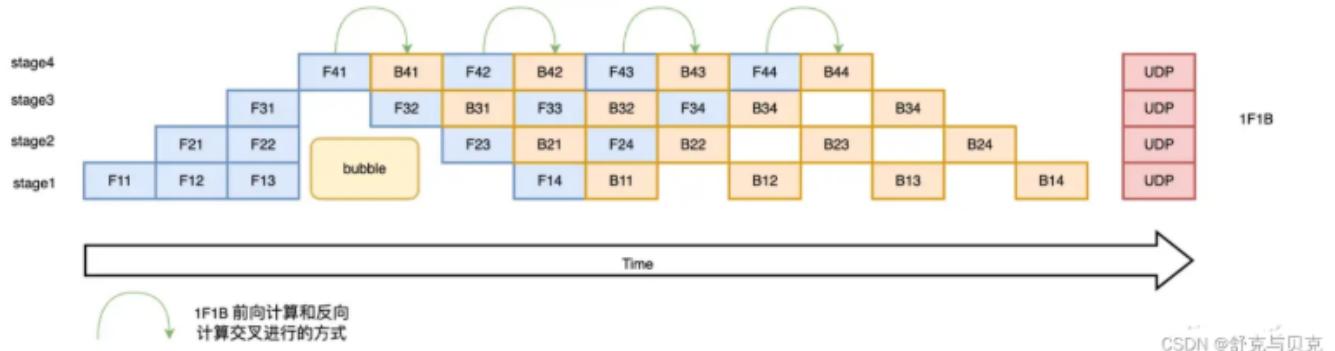
流水线并行策略

F-then-B策略

- 先进行前向计算，再进行反向计算
- 具体来说就是前向计算完一个mini-batch，再反向传播这个mini-batch

1F1B策略

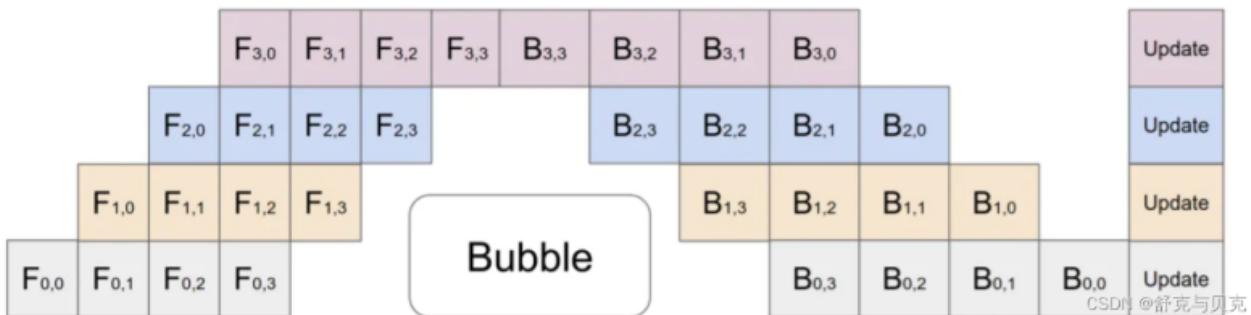
- 前向计算和反向计算交叉进行，可以释放不必要的中间变量
- 示例如下图所示，以 stage4 的 F42 (stage4 的第 2 个 micro-batch 的前向计算) 为例，F42 在计算前，F41 的反向 B41 (stage4 的第 1 个 micro-batch 的反向计算) 已经计算结束，即可释放 F41 的中间变量，从而 F42 可以复用 F41 中间变量的显存



- 显存占比明显下降

Gpipe流水线并行

谷歌提出的流水线并行，使用的是F-then-B策略



核心：它把一个Mini-batch，拆解成更小的Micro-batches，比如上图的把一个Mini-batch，拆成4个Micro-batches

好处：当前向计算的第一个Micro-batch1被GPU0计算完毕，它就会传递到模型的下一层GPU1，然后GPU0可以继续计算Micro-batch2

坏处：对于那些需要统计量的层（如：Batch Normalization），就会导致计算变得麻烦，需要重新实现。在Gpipe中的方法是，在训练时计算和运用的是micro-batch里的均值和方差，同时持续追踪全部mini-batch的移动平均和方差，以便在测试阶段进行使用

PipeDream — DeepSpeed

微软提出的流水线并行策略，非交错式1F1B

Gpipe的流水线有以下问题：

- 将mini-batch切分成m份micro-batch之后，会带来更频繁的流水线刷新（当GPU流水线并行训练时出错进行检查点重载）
 - Pipeline Flush（流水线刷新）是流水线并行系统中的一种重置操作，其本质是：
 - 丢弃所有未完成的计算（半成品微批次）
 - 释放被占用的计算/通信资源
 - 回滚到最近的安全状态（如检查点）
- 将mini-batch切分成m份micro-batch之后，需要缓存m份激活值，会导致内存增加

PipeDream具体方案如下：

- 一个阶段做完一次micro-batch的前向传播之后，就立刻进行mirco-batch的后向传播，然后释放内存
- 如下图所示，machine1先执行micro-batch的forward，然后把激活值传给machine2，以此类推
- 从machine4进行反向传播，逐步传递梯度至machine1，然后逐渐进入稳定状态（1F1B）
- 斜线的方块就是Bubble，也就是GPU的空闲时间

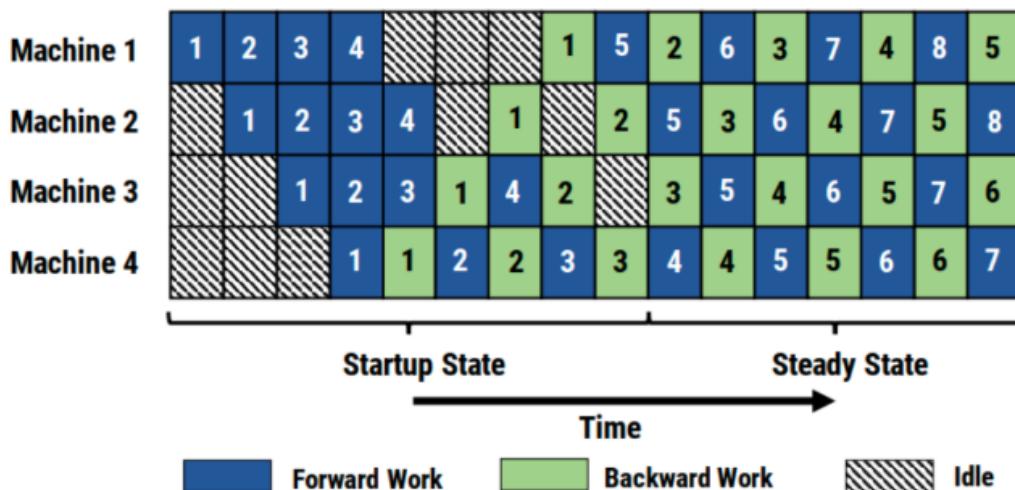


Figure 8: An example pipeline with 4 machines, showing startup and steady states.

问题：

- 当前向传播的5号Micro-batch在Machine1上就开始传递的时候，实际上它使用的权重是Micro-batch 1做完了反向传播之后更新的权重，此时FW2-4并没有进行更新
 - 如果 **Micro-batch 5** 的前向计算使用了 **最新版本的权重**（即 **Micro-batch 1** 反向更新后的权重），而 **Micro-batch 5** 的反向计算又使用了 **更晚更新的权重**（如 **Micro-batch 4** 反向更新后的权重），就会导致 **梯度计算不一致**，影响训练稳定性
- 同理，Machine2上FW5又是在batch1-2做完反向传播后进行更新的，而Machine1是在做完了batch1的反向传播后进行更新的，**Machine1和Machine2的权重又起了冲突**

解决方法：

在1F1B的基础上，PipeDream引入了**Weight stashing**和**Vertical Sync**两种技术来矫正权重的冲突和同步

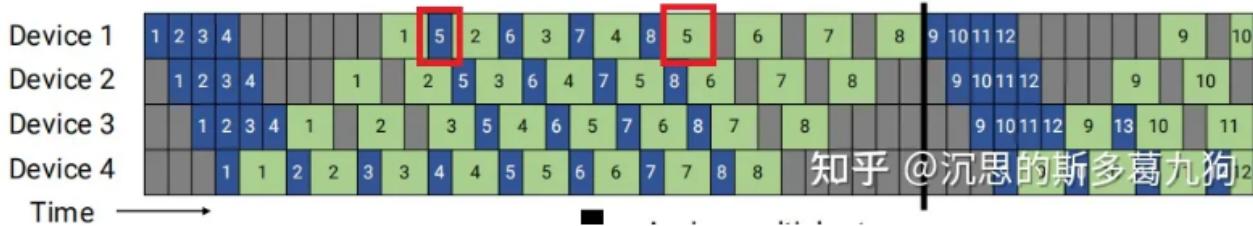
- **Weight stashing**（权重暂存）：为权重维护多个版本，每个 Micro-batch 的前向计算所使用的权重会被暂存，并在其反向计算时复用
 - 具体流程：
 1. 前向计算时：Machine 1 使用 **当前最新版本的权重** 计算 **Micro-batch 5** 的前向结果，并 **保存该版本的权重**（记为 **W_5** ）
 2. 反向计算时：Machine 1 在计算 **Micro-batch 5** 的反向传播时，**使用之前暂存的 W_5** ，而不是最新的权重
 3. 参数更新：反向传播完成后，**梯度更新仍然作用于最新版本的权重**（即 **W_5** 的梯度会更新到当前最新的权重上）
- **Vertical Sync**（垂直同步）：每个 Micro-batch 进入流水线时，会记录当前最新版本的权重，并在整个生命周期（所有 Stage）中使用该版本
 - 具体流程：
 1. Micro-batch 进入流水线时，Machine 1 会记录当前最新版本的权重（如 **W_1** ），并 **将该版本号传递给后续所有 Stage**
 2. 所有 Stage 在处理该 Micro-batch 时，**都使用 W_1** ，而不是各自的最新权重
 3. 梯度更新：反向传播完成后，梯度仍然更新到 **最新版本的权重**（即 **W_1** 的梯度会更新到当前最新的权重上）

问题解析

问题1：同一个微批次数据，相同的device（相同stage），在前向计算和反向计算，采用不同版本的模型参数

示例：

- Device 1 的微批次5数据，在前向传播使用了第1个版本模型（微批次1反向传播完成），
- Device 1 的微批次5数据，在反向传播使用了第4个版本模型（微批次1、2、3、4反向传播完成）



解决办法：**Weight Stashing**方法

每个device多备份几个不同版本的权重，确保同一个微批次数据，在前向计算和后向计算采用同一个版本的模型权重。计算前向传播之后，会将这份前向传播使用的权重保存下来，用于同一个 minibatch 的后向计算

示例：

- Device 1 的微批次5数据，在前向传播使用了第1个版本模型（微批次1反向传播完成）
- Device 1 的微批次5数据，在反向传播使用了第1个版本模型（微批次1反向传播完成）

问题2：同一个微批次数据，相同的操作（都是前向或者都是反向），在不同的device上（不同stage），采用不同版本的模型参数

示例：

- Device 1 的微批次5数据，在前向传播使用了第1个版本模型（微批次1反向传播完成）
- Device 2 的微批次5数据，在前向传播使用了第2个版本模型（微批次1、2反向传播完成）

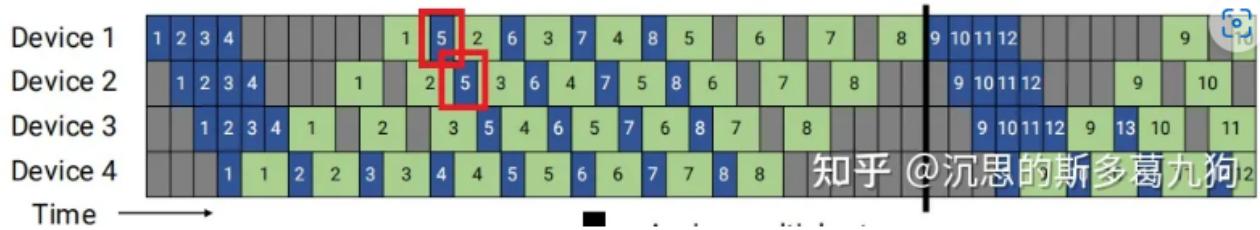


image-20250816005535158

解决方法：**Vertical Sync** 方法

每个批次数据进入pipeline时都使用当前device（阶段）最新版本的参数，并且参数版本号会伴随该批次数据整个生命周期，从而实现了**device（阶段）间的参数一致性**

示例：

- Device 1 的微批次5数据，在前向传播使用了第1个版本模型（微批次1反向传播完成）
- Device 2 的微批次5数据，在前向传播使用了第1个版本模型（微批次1反向传播完成）

混合精度训练

大部分情况下，计算都是在**float16**下进行，但是优化器会保存一份**float32**的精度值（Master-Weight）

训练过程

1. 将**Master-Weight**转换为**fp16**
2. 和**inputs**一起进行前向传播、反向传播，存储的激活值也是**FP16**
3. 梯度传入优化器，被转换为**fp32**用于参数更新

Master-Weight(FP32)



image-20250813120951515

Loss Scaling

1. 用fp16精度的权重进行前向传播计算损失，损失为fp32
2. 然后进行损失缩放，得到fp32（缩放后）的损失
3. 再把损失转换为fp16的梯度，进行反向传播梯度计算，接着转回fp32的梯度
4. 再次进行缩放，得到fp32位的梯度，进行参数更新

将梯度进行放大，可以避开fp16的下溢区间（因为梯度一般来说都很小，会在FP16的下溢区间）

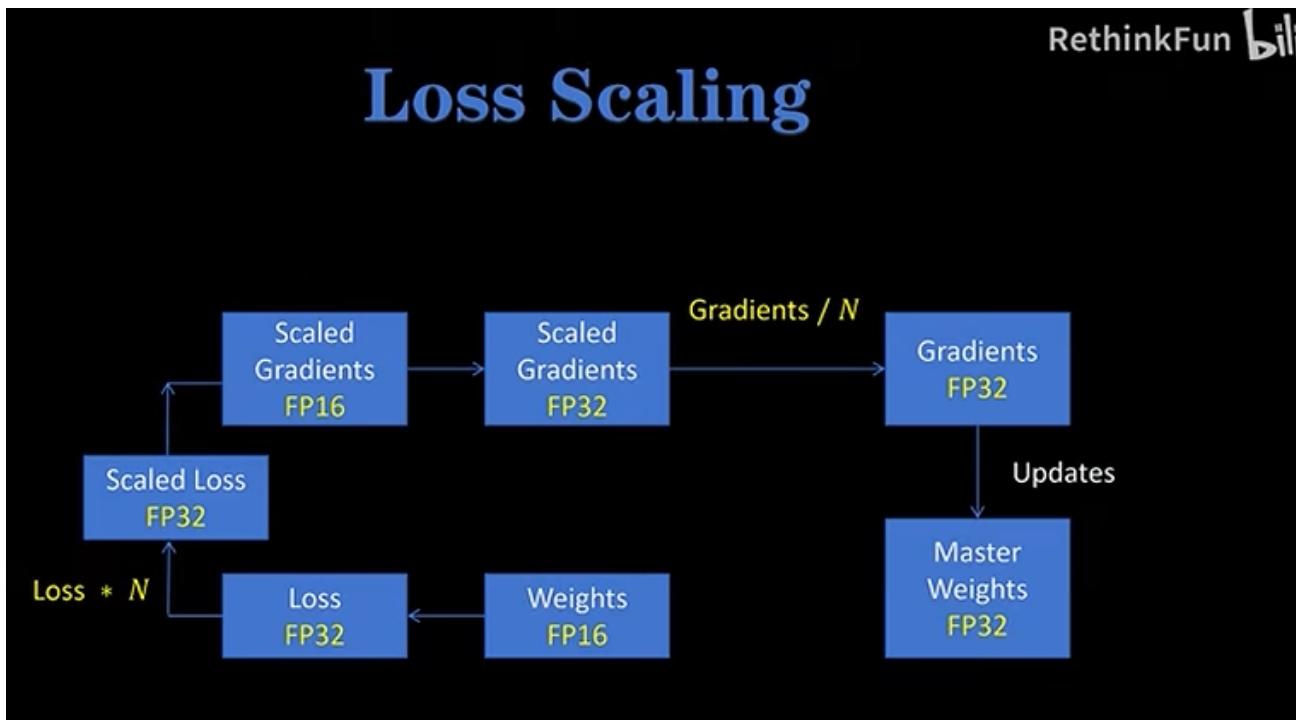


image-20250813121114207

一般在线性层、卷积、RNN使用fp16，在累加过程中用fp32

浮点型的表示

将浮点数转换为二进制，再转换为科学计数法



image-20250813115950009

各种精度

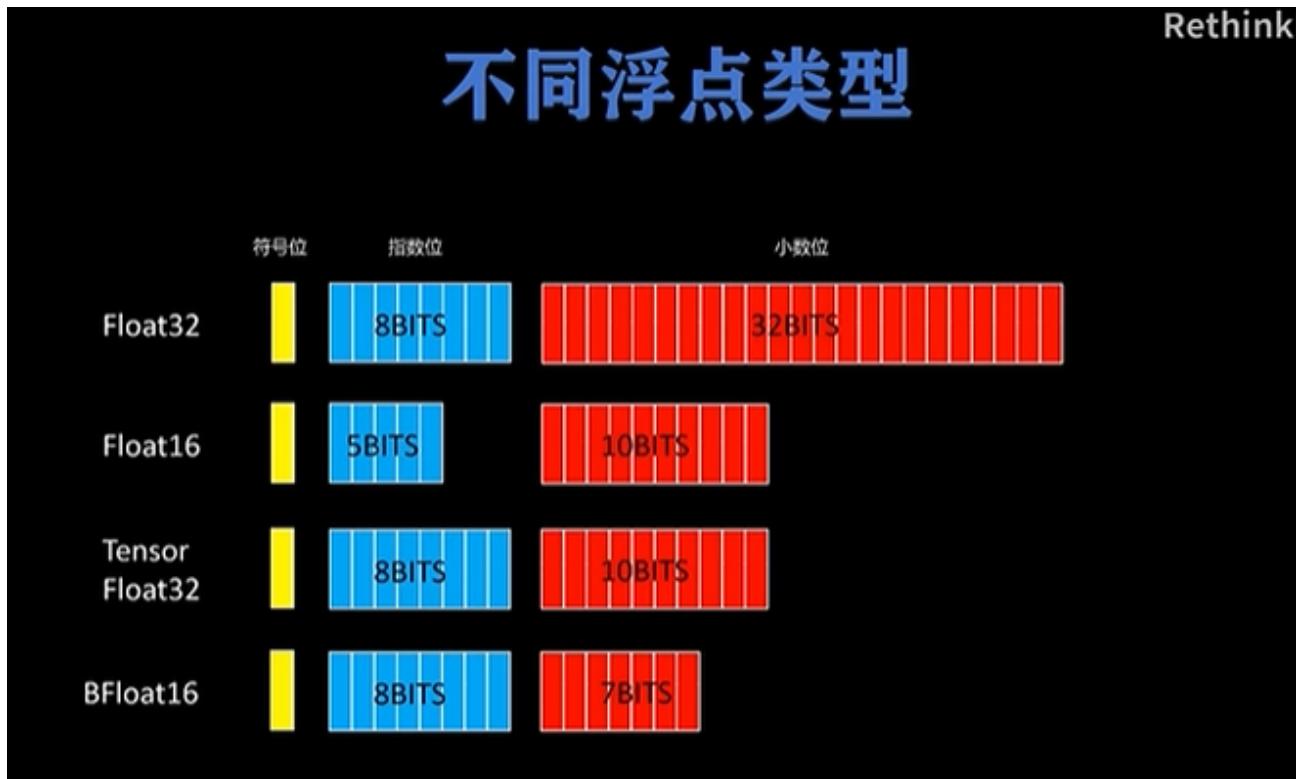


image-20250813115500851

低精度带来的问题

1. 表示范围有限
2. 大数吃小数问题，大的数和小的数相加，小的数要转换为和大的数一样的指数表示，转换后的小数位太小，低精度无法表示，因此溢出

低精度带来的问题

一. 表示范围问题

二. 大数吃小数问题

$$2048 + 0.5 = 2048$$

$$2048 \quad 1.0 * 2^{11}$$

$$0.5 \quad 1.0 * 2^{-1} \quad 0.00000000001 * 2^{11}$$

image-20250813115927153

注意力机制变体

MHA、MQA和GQA

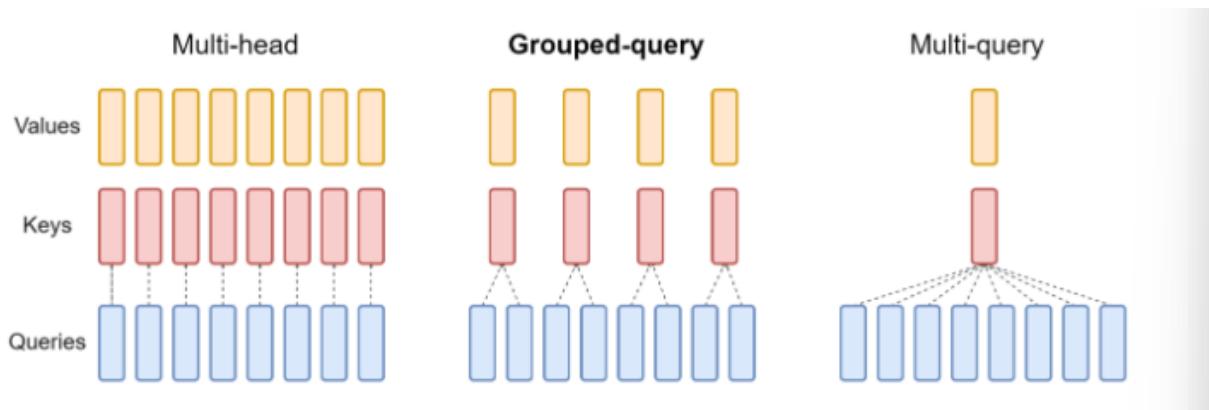


image-20250816120438735

MHA

之前说过，不赘述

MQA (Multi-Query Attention)

多头查询注意力

原理：

- 将原生Transformer每一层多头注意力的key矩阵、value矩阵改为该层下所有头共享，即K、V矩阵每层只有一个，Q矩阵不受影响。

- 在同一层的注意力机制中，多个头共享相同的K、V矩阵
- 层内KV共享，而不是跨层共享

好处与坏处：

- 大幅度减少了参数量，推理得到了加速
- 但会造成模型性能的损失，且训练的时候模型不稳定

GQA (Grouped-Query Attention)

分组查询注意力

原理：

- 将Query进行分组，每个组内共享一组Key、Value
- 令组的个数为N，N=1时为MQA，N等于Query的数量则退化为MHA

好处：

- 通过分组减少模型性能损失，使推理性能接近MHA，同时也减少了参数量

MLA (Multi-Head Latent Attention)

多头潜在注意力，在Deepseek-V3中提出

为何提出？

- KV Cache虽然加速了模型推理，但是占据了大量显存空间
- 上文提到的MQA和GQA虽然降低了KV Cache计算量（），但是性能损失太多

目的是什么？

- 降低推理过程中的KV Cache资源开销
- 缓解MQA，GQA对性能的损耗

怎么做的？

- 对Key和Value矩阵进行了一个低秩联合压缩（通过低秩转换为一个压缩的KV，使得存储的KV的维度显著减小）
- 如下图所示，阴影表示的是KV缓存，在MLA中的KV缓存是最少的

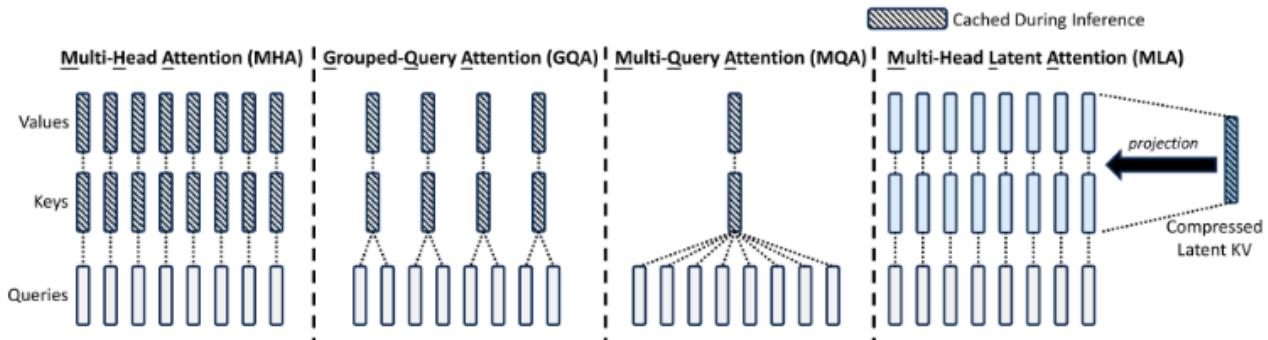


image-20250816120905940

下面来看看怎么压缩的

对Query和Key进行拆分，拆分为 $[q_t^R \quad q_t^C]$, $[k_t^R \quad k_t^C]$ ，其中一部分做压缩(q_t^C, k_t^C)，另一部分做RoPE编码(q_t^R, k_t^R)

1. 输入隐藏层状态 h_t
2. 通过低秩分解生成 c_t^{KV} 、 c_t^Q
 - c_t^{KV} 为KV潜在向量
 - c_t^Q 为Q潜在向量
3. 将Key和Value分成两部分
 - 静态缓存部分：推理时缓存的低维 Key 和 Value。即 $k_{t,i}^C, v_{t,i}^C$
 - 动态残差部分：补充压缩可能丢失的细节信息。即 $k_{t,i}^R$ （直接通过输入的隐藏层获取）
4. 同时对Query也分成两部分，一部分做压缩 $q_{t,i}^R$ ，一部分应用旋转编码 $q_{t,i}^C$ （这里是先压缩再分成两部分的）
5. 对Q、K、V的不同部分进行拼接，进行多头注意力计算

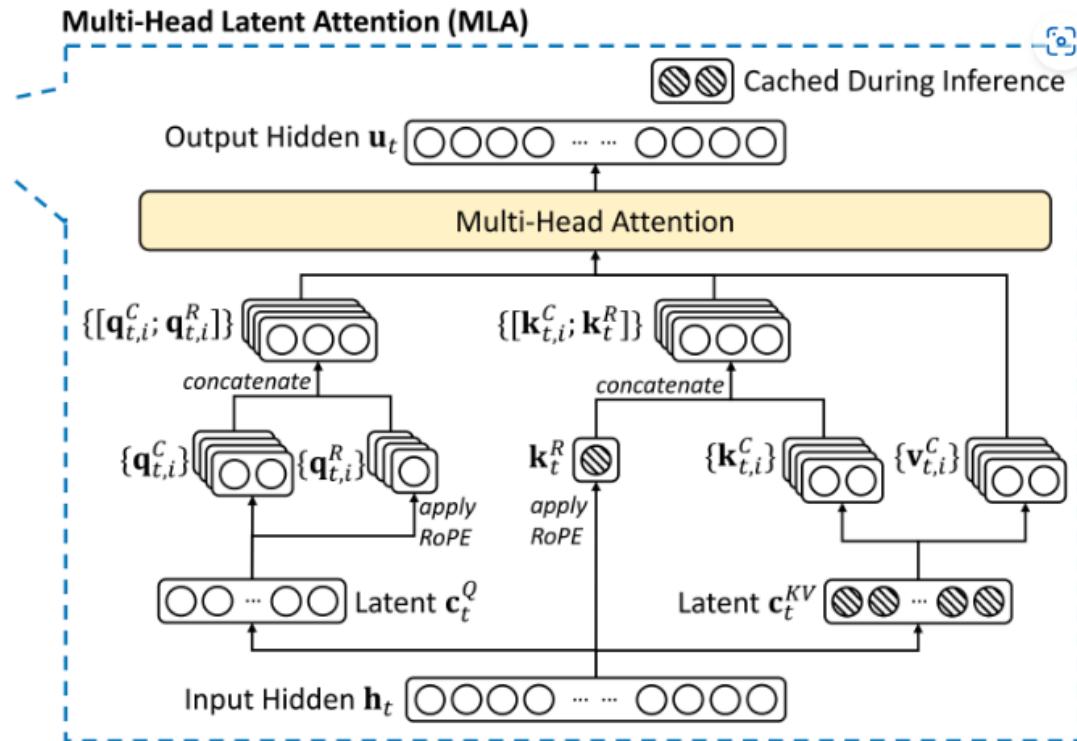


image-20250816131927886

对KV进行联合压缩

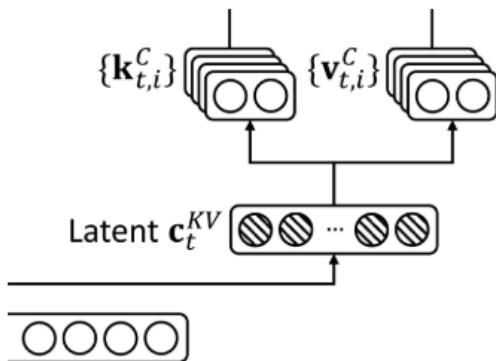


image-20250816133715163

三个变量 c_t^{KV} 、 k_t^C 、 v_t^C 分别通过如下三个公式得来

$$c_t^{KV} = W^{DKV} h_t k_t^C = W^{UK} c_t^{KV} v_t^C = W^{UV} c_t^{KV}$$

就是针对 KV 先一块降维，然后再分别升维

在推理的过程中，只需要缓存每一步的 c_t^{KV} ，然后再计算还原回原始的 K、V 即可

对 Q 压缩降维、再升维

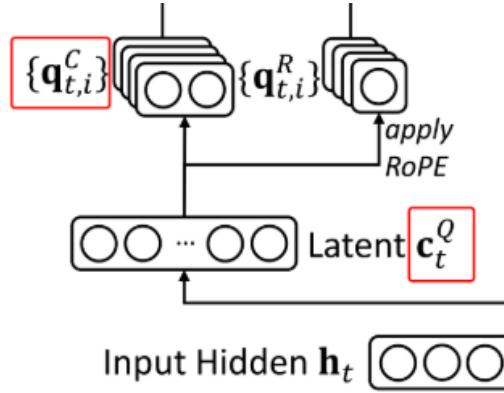


image-20250816135113159

公式如下

$$c_t^Q = W^{DQ} h_t q_t^C = W^{UQ} c_t^Q$$

这并不能降低 KV Cache，但可以减少训练过程中的激活内存

MLA 对 Q 和 K 的 RoPE 编码

MLA 需要对 k_t^R 和 q_t^R 应用 RoPE 编码，但是 RoPE 与 低秩压缩是不兼容的

- RoPE 对 Q 和 K 的编码是动态的，因此在推理的时候，RoPE 必须实时计算
- 如果对压缩后的 c_t^{KV} 应用 RoPE，这就意味着旋转矩阵 R_n 与 低秩矩阵 W_{QK} 耦合，并且无法缓存 K_{rot} ，因为 RoPE 需要进行实时计算，KV Cache 的优势丧失

$$K_{rot} = R_n (W_{QK} \cdot c_t^{KV})$$

- 且矩阵乘法不满足交换律，无法将 W_{QK} 吸收到其它权重中

原始注意力分数

$$S = (W^{UQ})^T (c_t^Q)^T R_m^T R_n c_t^{KV} W^{UK}$$

它不等于

$$S = (c_t^Q)^T R_m^T (W^{UQ})^T W^{UK} R_n c_t^{KV} = (c_t^Q)^T R_m^T W_{merge} R_n c_t^{KV}$$

因为矩阵不满足交换律，也就无法将 W_{QK} 吸收到其它权重中

MLA 通过对 RoPE 和 c_t^{KV} 进行解耦！！！ 来解决这个问题

1. 静态缓存部分 (k_t^C) :

- 低秩压缩后的 K (c_t^{KV}) 不应用 RoPE，直接缓存

- 推理时只需存储低维 c_t^{KV} , 显存占用极低

2. 动态 RoPE 部分 (k_t^R) :

- 从输入 h_t 动态生成, **单独应用 RoPE**
- 补充位置信息, 避免与低秩矩阵的耦合

3. 合并计算

- 最终 $K = [k_t^C; k_t^R]$, 既保留了位置信息, 又利用了 KV Cache

MFA (Multi-matrix Factorization Attention)

多矩阵分解注意力

没博客和视频教啊！！！后面看论文吧

注意力机制加速

Paged Attention

内存优化

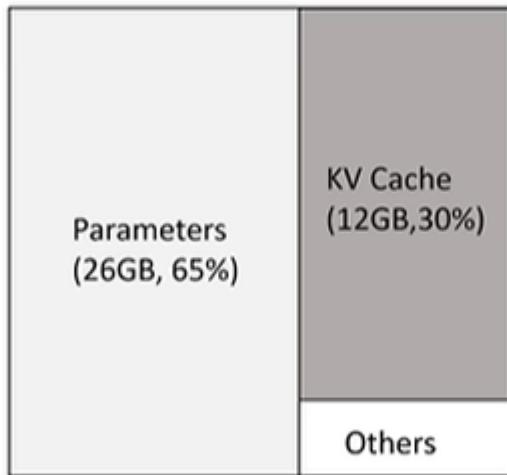
核心思想: 将操作系统的内存分页思想引入显存管理, 大幅度降低显存占用

首先要明确:

- GPU、CPU 对 **连续内存** 的访问效率远高于非连续内存
- 频繁申请/释放 GPU 显存会让其 **显存变得零散**, 降低利用率

传统注意力计算的显存有三种类型的浪费

- 推理的时候是按照**最大序列长度预分配显存**的, 如果输出的序列**没这么长**, 会导致显存浪费
 - 比如输出的序列是 **我爱中国**, 模型输出最大序列长度是 1024, 那么预分配的显存就是 1024 个 token, 但输出序列只占了 4 个 token, 造成显存大量浪费
- 大模型的推理是**自回归任务**, 下一个 token 即使还未生成, 显存已经为其预留好了, 无法和**其它生成任务并行**
 - 比如我这个任务**要生成 1000 个 token**, 现在生成到第 5 个 token, 此时有个新的任务**只需要生成 10 个 token**, 但后面 995 个 token 的显存已经被占用了, **新任务无法分配到显存**
- 显存利用碎片化, 显存分配是随机的
 - **已释放的显存空间不连续**: 显存占用情况: [空闲 500MB] [已占 1GB] [空闲 300MB] [已占 2GB]。假设有一个任务占用 500MB 显存, 现在任务完成将他释放, 但是新任务需要 600MB 显存, **没法为其分配连续的显存, 报错**
 - **序列间的显存块太小**: 显存被多个**并发生序列分割**占用, 剩余的空闲块尺寸小于**新请求所需的最小单位**



13B LLM on A100-40GB

image-20250819121745375

具体是怎么做的

- 分页存储：vLLM 启动时会预先分配一批固定大小的显存页，形成一个空闲页池

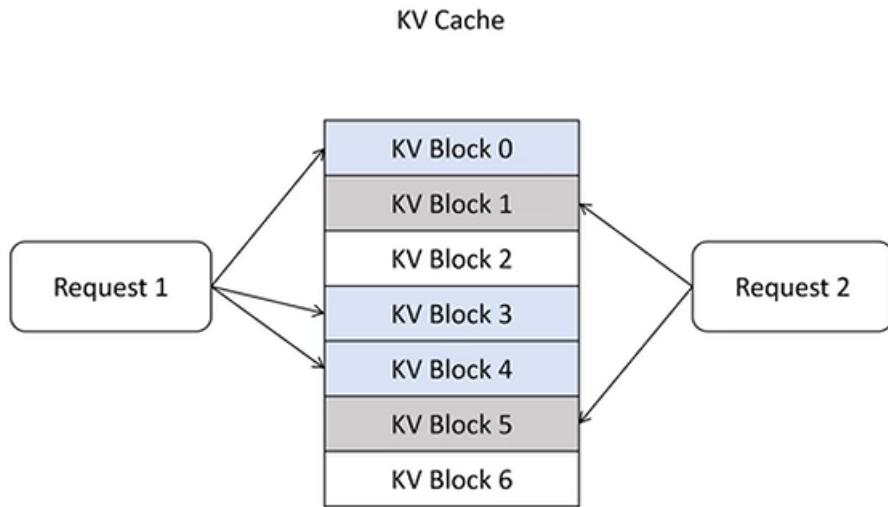


image-20250819121817645

- 动态分配显存：**每次生成都会预留一页token的显存，当生成新token的时候检查当前页是否用完，用完了就从空闲页池申请新页
- 逻辑表映射：**分配显存的时候，每一页物理上是不连续的，但是Paged Attention通过维护一个逻辑页表将物理不连续的显存页映射为逻辑上连续的KV Cache

image-20250819121841203

- **显存不足：**会将不活跃的页换出到CPU，需要的时候再换回，或者尝试释放已使用完的页
- **KV Cache共享：**当Prompt相同的时候，Paged Attention会将相同的KV Cache进行共享
 - **页表映射共享：**多个生成序列的逻辑页表可以指向同一个物理显存页，存储共享的 KV 数据
 - **写时复制（Copy-on-Write）：**当某个请求需要修改共享页的内容时，系统会先复制该物理页到一个新页（如从页3复制到页5），仅更新当前请求的页表，其他请求仍指向原页

Flash Attention

计算优化，着眼于减少IO访问量，通过芯片内缓存（SRAM中的）加快IO速度

看完下文GPU工作原理，你可以知道计算单元从SRAM读取数据的速度要比从HBM读取快得多，因此**Flash attention**的目标就是避免Attention计算的时候从HBM读写数据

image-20250820134630626

这项技术为何而生？

- 传统注意力计算是从HBM读取数据进行计算，速度要慢得多
- **读取速度太慢，算力太强**，导致GPU算力资源一直在等待数据读取
- 传统注意力计算不对矩阵进行分块处理，导致SRAM放不下这么大的数据，Pytorch虽然做了分块，但是需要多次读写中间结果，导致计算瓶颈

先来看看pytorch在attention上的实现

- 从HBM加载Q、K到SRAM
- 计算出 $S = QK^T$
- 将 S 写到HBM（这里是为了存储中间激活值，做反向传播）
- 从HBM读取 S 到HRAM
- 计算 $P = softmax(S)$
- 将 P 写到HBM（这里是为了存储中间激活值，做反向传播）
- 从HBM加载 P 到SRAM
- 计算 $O = PV$
- 把 O 写到HBM
- 返回 O

传统计算的性能瓶颈

- **Compute-Bound（计算瓶颈）：**
 - 来源：大的矩阵乘法，多通道的卷积
 - **程序性能受限于GPU的计算能力**，大部分时间花在数值运算或逻辑处理上
- **Memory-Bound（内存瓶颈）：**
 - 来源：ReLU，Softmax，Sum，Dropout等
 - **程序性能受限于内存访问速度**，GPU经常等待数据加载

先介绍下**Safe-Softmax**

传统softmax

$$softmax(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{j=1}^n e^{x_j}}$$

若使用混合精度进行训练，当输入数值 x_i 非常大时，会造成数值溢出

Safe Softmax

$$\text{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i - \max(x)}}{\sum_{j=1}^n e^{x_j - \max(x)}}$$

- 通过减去输入的最大值 $\max(x)$ 来避免数值溢出
- 相当于分子分母同时除以 $e^{\max(x)}$ ，结果不变

核心工作原理是什么？

• Tiling Algorithm (分块计算)

- 核心思想就是根据SRAM块的大小将大的矩阵拆分成小的矩阵送入SRAM进行计算
- 传统注意力机制需要重复读写SRAM，而Flash Attention将矩阵分块后在SRAM中一次性算出最终结果

• Recomputation (重计算)

- GPU计算时间小于HBM读写时间，不再存储中间结果，反向传播的时候重新计算即可
- 对于 $S = QK^T$ ，Flash Attention不进行HBM的存储，而是继续在SRAM中计算
- 对于 $P = \text{softmax}(S)$ ，也不进行HBM的存储，而是继续集散

• Kernal Fusion (融合计算)

- 将多个操作融合成一个操作，以此减少HBM的读写
- 分块计算可以用一个Kernel完成注意力计算的所有操作

接下来看看分块计算在SRAM中是如何一次性到位的

- 首先取Q、K、V的小块，送入SRAM
- 计算 $S = QK^T$
- 计算 $P = \text{softmax}(S)$
 - 这里并不是全局的softmax，而是局部的softmax
 - 取出局部最大值，然后使用Safe-Softmax
 - 下一次进入Safe-Softmax的时候，用上次的局部最大值和当前块的最大值算出新的最大值，然后进行Safe-Softmax的更新
 - 举例：分为2块计算， $x_1 = [1, 2] x_2 = [3, 4]$
 - 计算第一块内的最大值 $m(x_1) = 2 = m(x)$
 - 第一个块内进行指数计算， $f(x_1) = [e^{1-m(x_1)}, e^{2-m(x_1)}] = [e^{-1}, e^0]$
 - 第一个块计算归一化因子 $l(x_1) = e^{-1} + e^0$
 - 操作第二个块，更新最大值 $m(x) = \max(m(x_1), m(x_2)) = 4$
 - 同上， $f(x_2) = [e^{3-m(x_2)}, e^{4-m(x_2)}] = [e^{-1}, e^0]$
 - 第二个块计算归一化因子， $l(x_2) = e^{-1} + e^0$
 - 计算全局 $f(x)$ 和 $l(x)$

$$f(x) = [e^{m(x_1)-m(x)} f(x_1), e^{m(x_2)-m(x)} f(x_2)] f(x) = [e^{-2}(e^{-1}, e^0), e^0(e^{-1}, e^0)] l(x) = e^{m(x_1)-m(x)} * l(x)$$

- 计算 $O = PV$
- 从SRAM中取出 O 回到HBM

GPU工作原理

使用SIMT单一指令，多线程进行，比如矩阵乘法里结果里的每个元素可以分配一个线程

GPU任务调度的最小单元：Warp（32个线程一组）

SM（流式多处理器）：GPU核心计算单元

- CUDA Cores (CUDA 核心)：执行基本算术和逻辑运算
- Tensor Cores (张量核心)：专用于加速矩阵乘法，支持混合精度计算
- Warp Scheduler (Warp 调度器)：管理Warp的执行，调度线程用的
- Shared Memory：供同一线程块的线程共享数据，可显式控制
- L1 Cache：缓存频繁访问的数据，硬件自动管理，无法直接控制
- Load/Store Units：负责从全局内存 (HBM) 或者共享内存 (Shared Memory) 加载数据
- Register File (寄存器文件)：存储线程的私有变量
- SFU：执行超越函数或者复杂运算

image-20250819141437101

GPU的存储分为芯片内和芯片外：

- SRAM (芯片内)：L1 Cache (仅对当前 SM有效)，L2 Cache (全局共享，所有SM共用)，Shared Memory (同一线程块共享)，用来存储数据，供计算单元快速读取
- HBM (芯片外)：我们常说的显存 (访问速度慢，空间大)，所有线程可访问

访问速度

image-20250819132629103

- NVLink：GPU间高速互联 (分布式训练)
- PCIe：CPU-GPU通信总线

因此要让计算模块尽可能多的从寄存器读取数据进行计算，因为寄存器带宽极高，访问速度极快

训练的时候数据传输流程：

1. 数据加载：通过PCIe把数据从CPU内存拷贝到GPU HBM
2. 计算准备：数据从HBM加载到L2 Cache然后到Shared Memory或者L1 Cache，最后传输到寄存器 (线程私有)
 - 先从HBM到全局共享区，所有SM共用，然后加载到特定SM，线程块可用，然后加载到指定线程的寄存器，给核心计算
3. 核心计算：CUDA Core或者Tensor Core参与计算
4. 数据传回：算好的数据传回HBM