

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

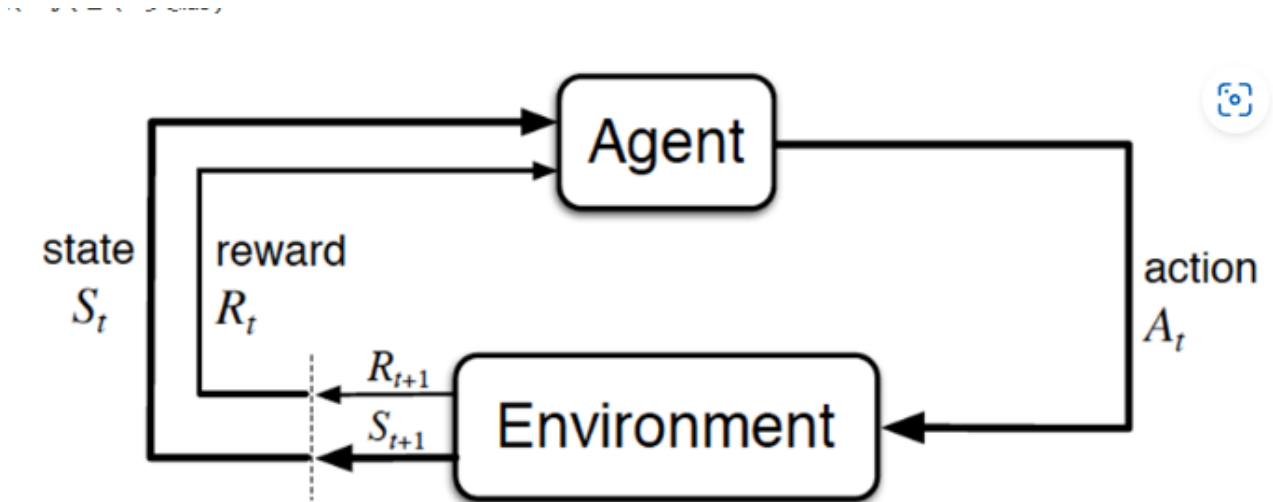


image-20250817115944207

- **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

		Today		
Yesterday	sun	0.50	0.375	0.125
	cloud	0.25	0.125	0.625
	rain	0.25	0.375	0.375

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

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

$$\gamma V(S_{t+1})$$

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**

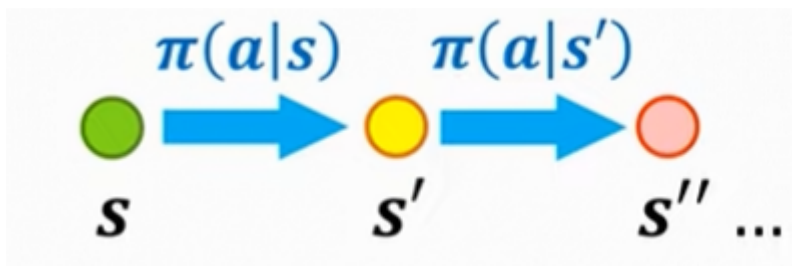
- 也就是通过加权求和把**动作的维度消除**，**减少运算量**

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

- 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

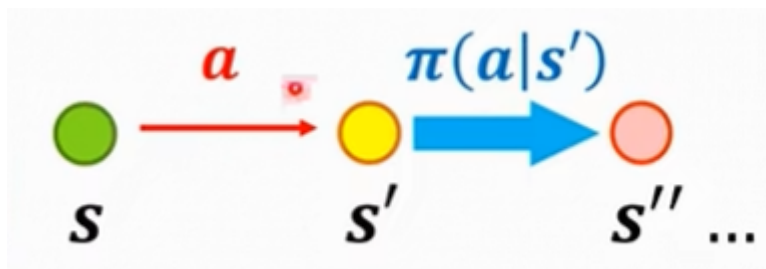
$$G_t = \underbrace{R_{t+1}}_{\text{立即奖励}} + \underbrace{\gamma R_{t+2}}_{\text{后继状态的折扣价值}} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}$$

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



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

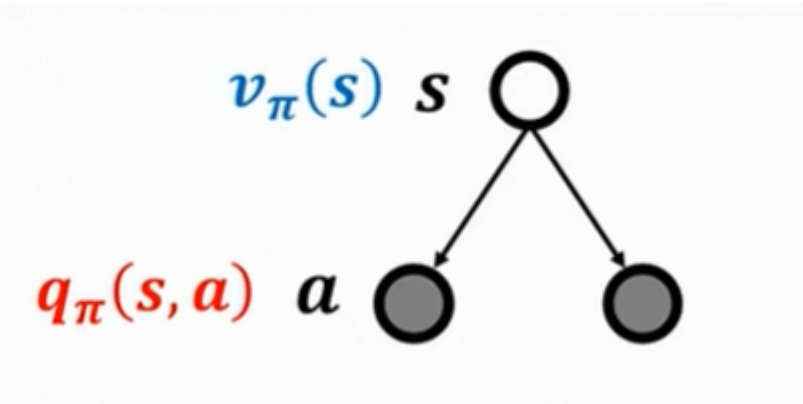
同上推导，可以得到动作值函数的贝尔曼期望方程

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

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

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

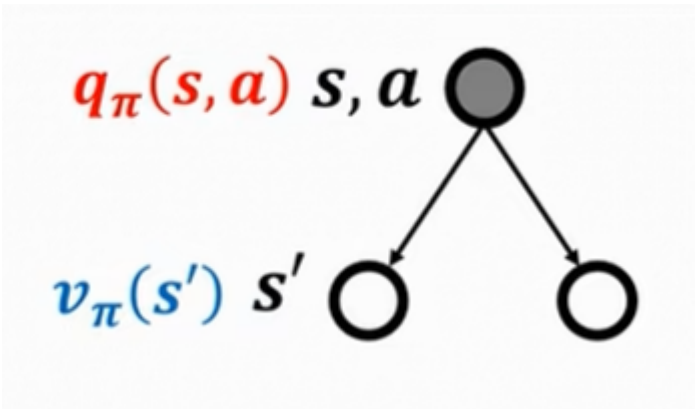


image-20250817181417147

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 $\pi_* \geq any \pi$
- 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

$$\pi_* \geq any \pi$$

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

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

最后得出**状态值函数的贝尔曼最优方程**

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

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

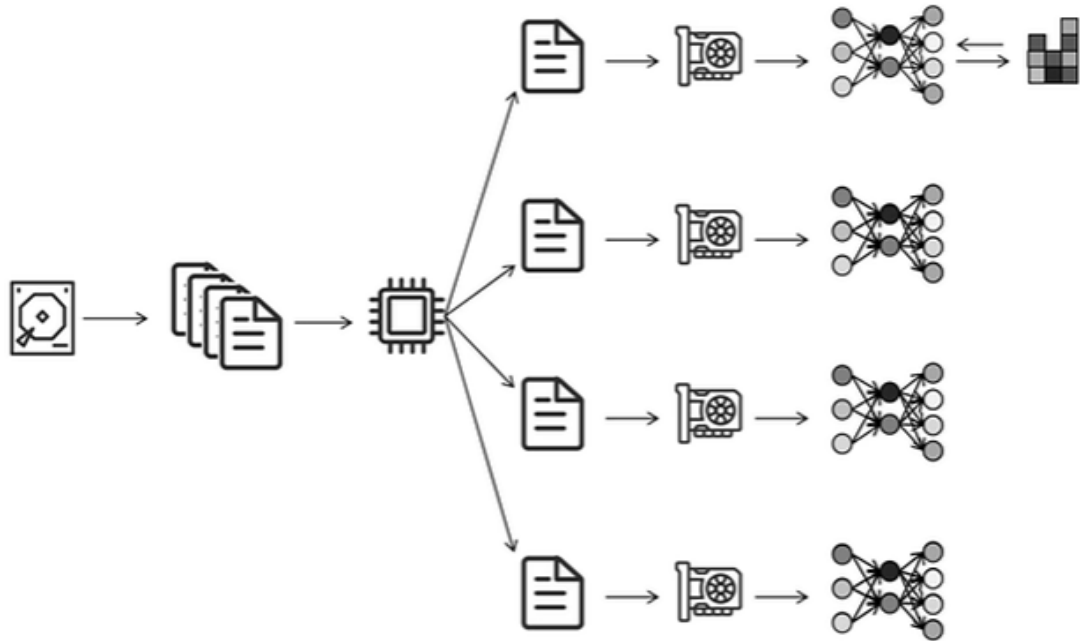


image-20250814165126760

工作流程

1. 用CPU将数据分成多份，给每个GPU一份
2. 每个GPU**独自进行训练**，将自己计算的梯度传递到GPU0上
3. GPU0用**全局平均梯度**更新自己的网络参数
4. 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

3-6min17s bilibili

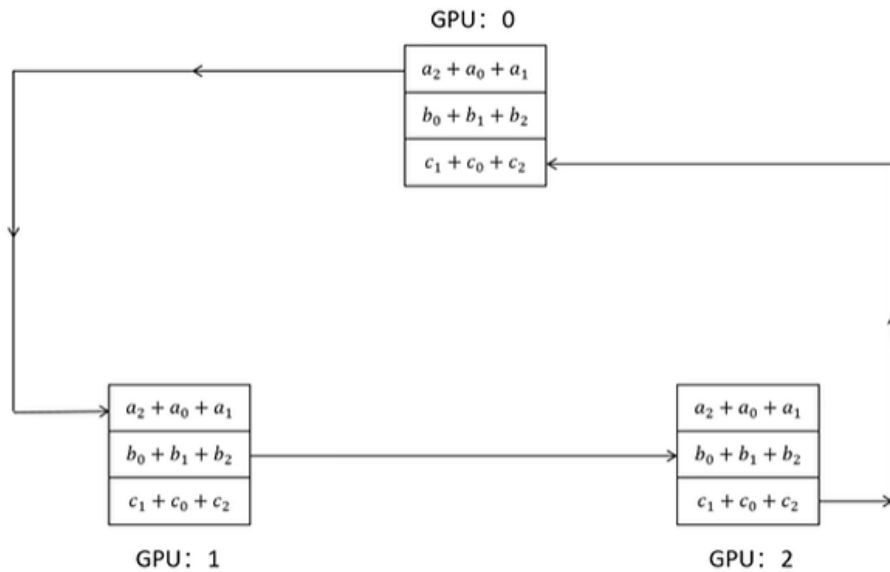


image-20250813101824156

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

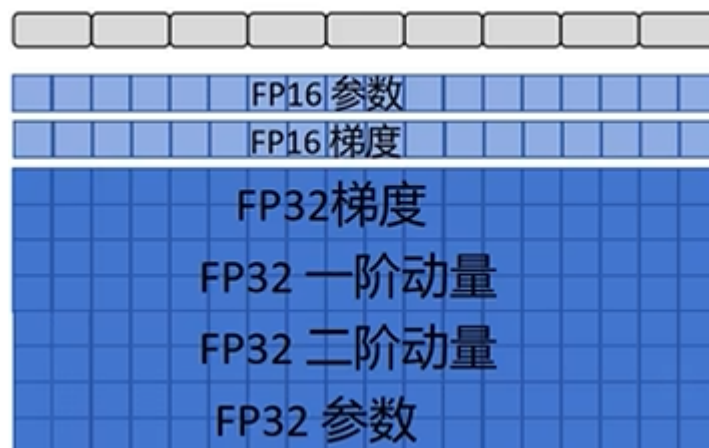


image-20250814170149855

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

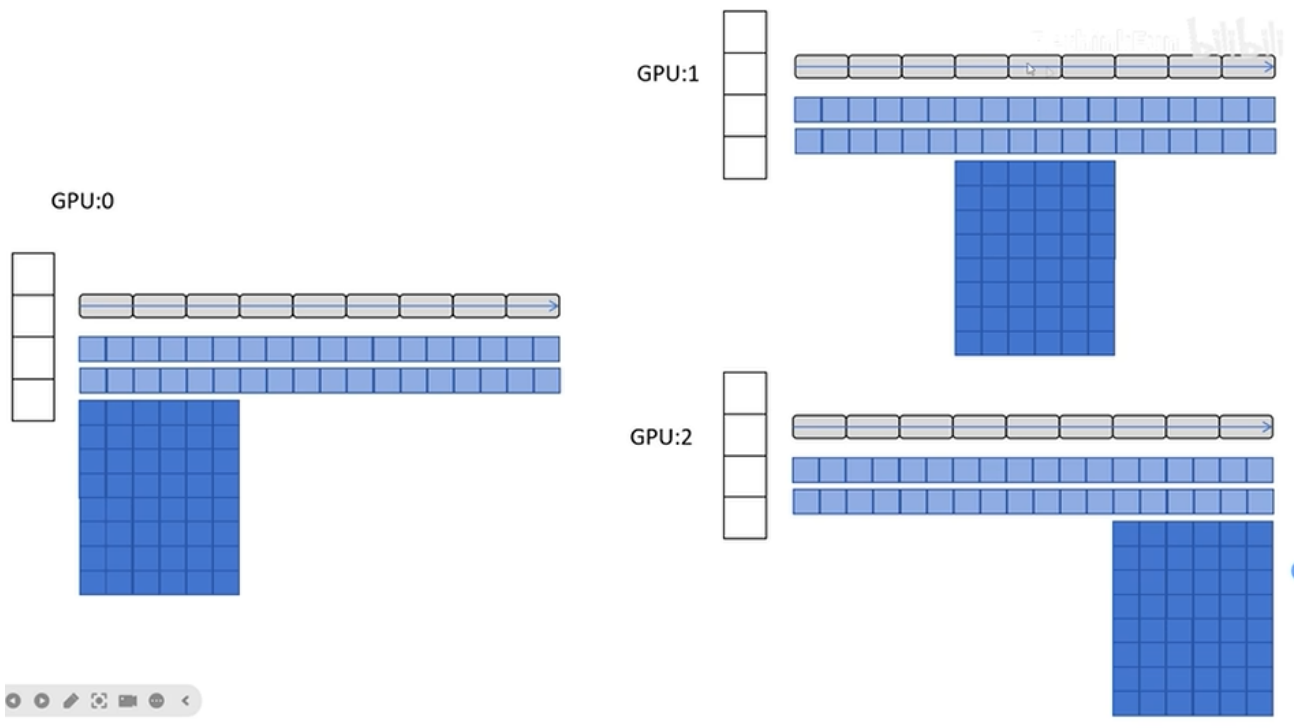


image-20250814170444276

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

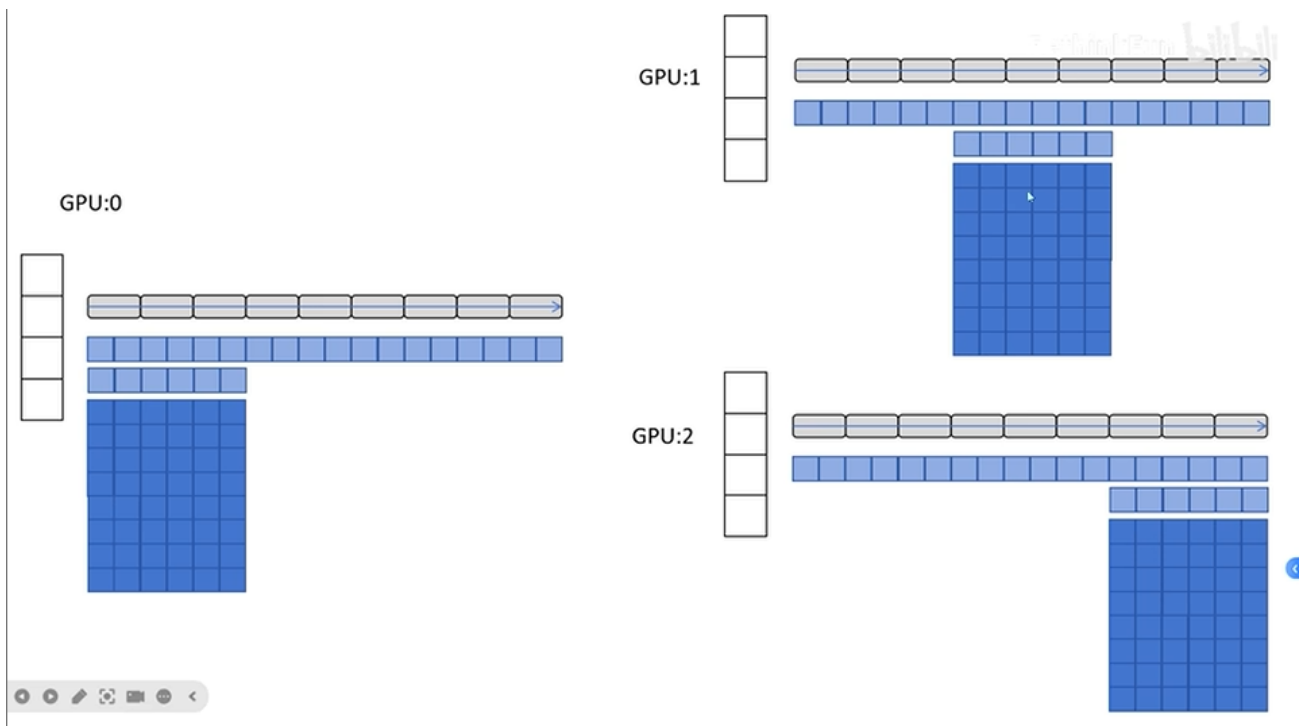


image-20250814171201197

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

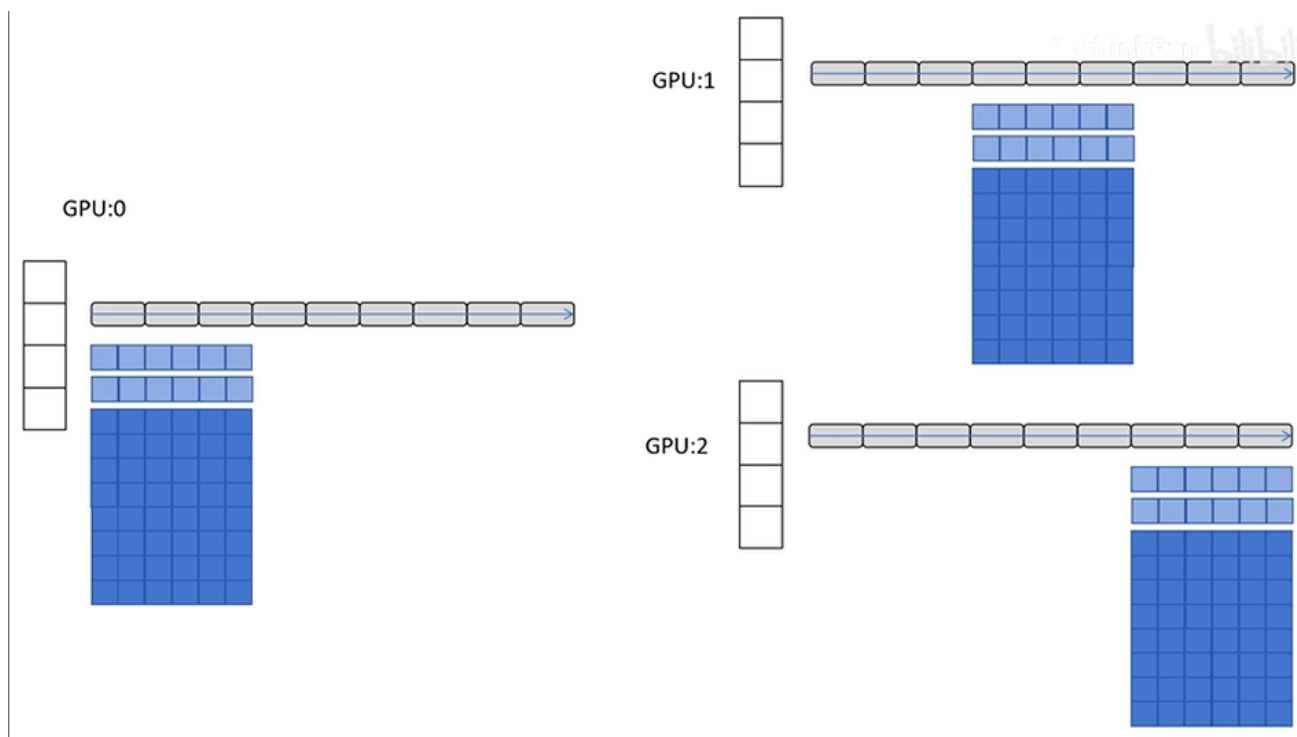


image-20250814172727460

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

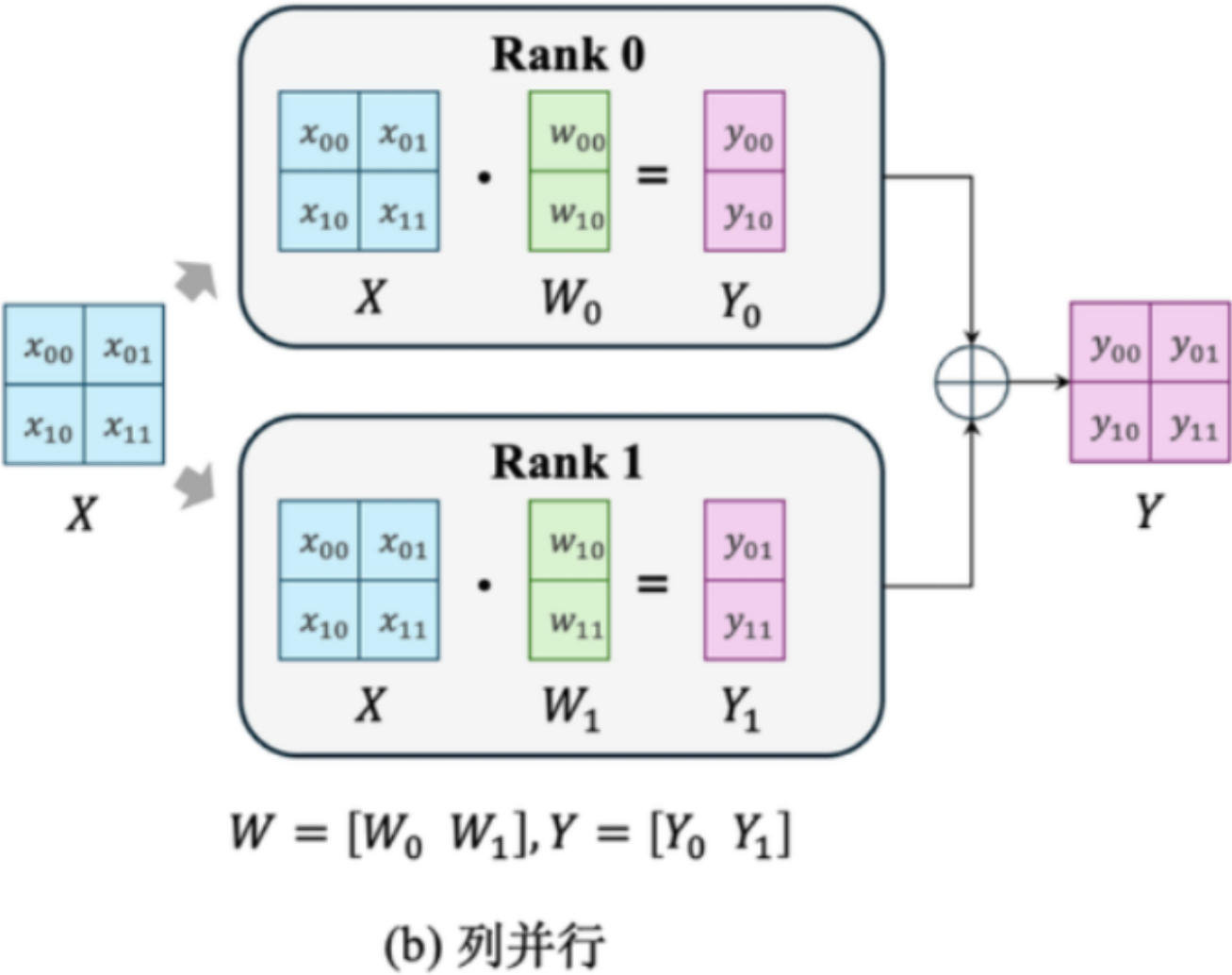
$$W = [W_0 \quad W_1]$$

接着

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

然后进行拼接

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



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

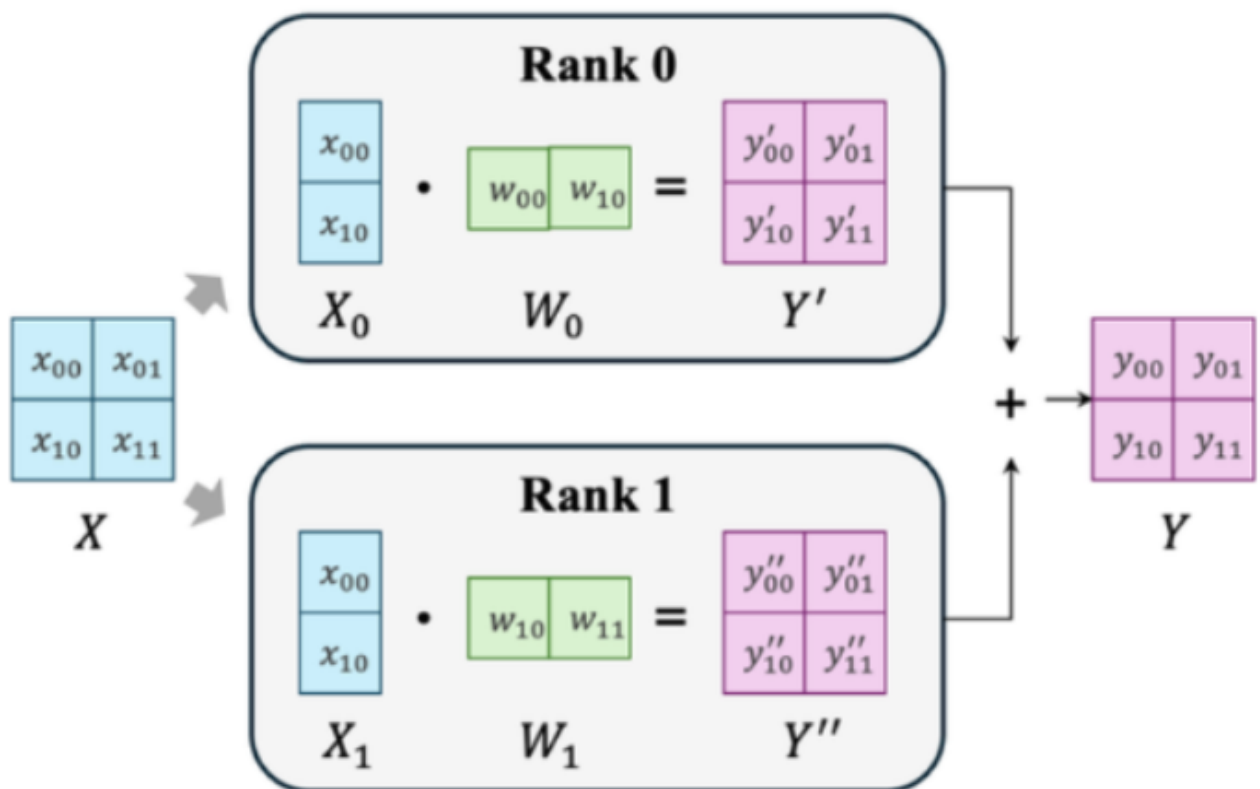
$$X = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 \end{bmatrix}$$

接着进行计算

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

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

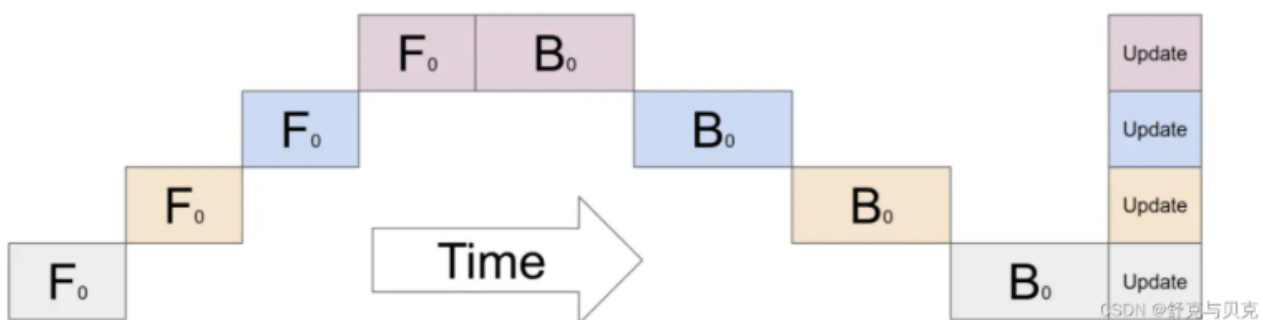
CSDN

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



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

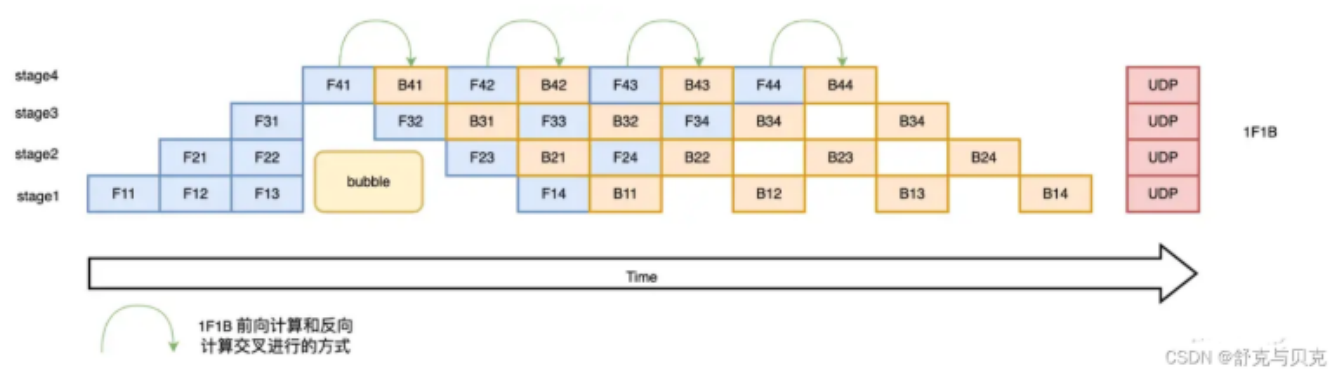
流水线并行策略

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

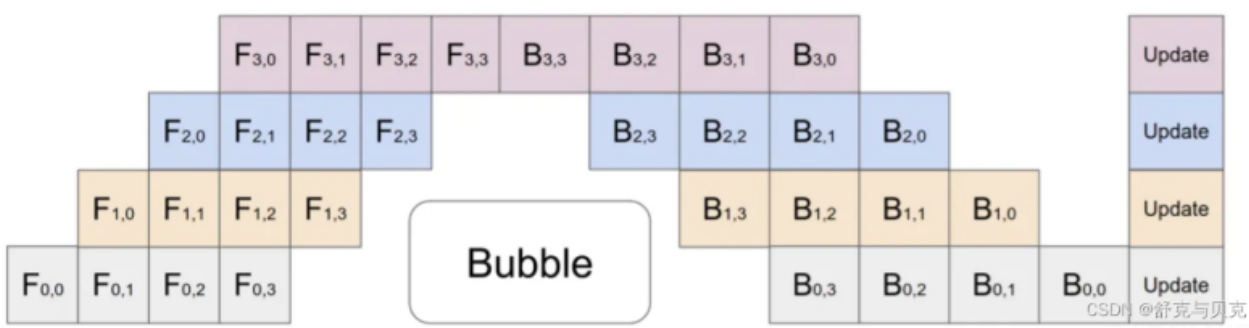
- 前向计算和反向计算交叉进行，可以释放不必要的中间变量
- 示例如下图所示，以 stage4 的 F42（stage4 的第 2 个 micro-batch 的前向计算）为例，F42 在计算前，F41 的反向 B41（stage4 的第 1 个 micro-batch 的反向计算）已经计算结束，即可释放 F41 的中间变量，从而 F42 可以复用 F41 中间变量的显存



- 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**micro-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

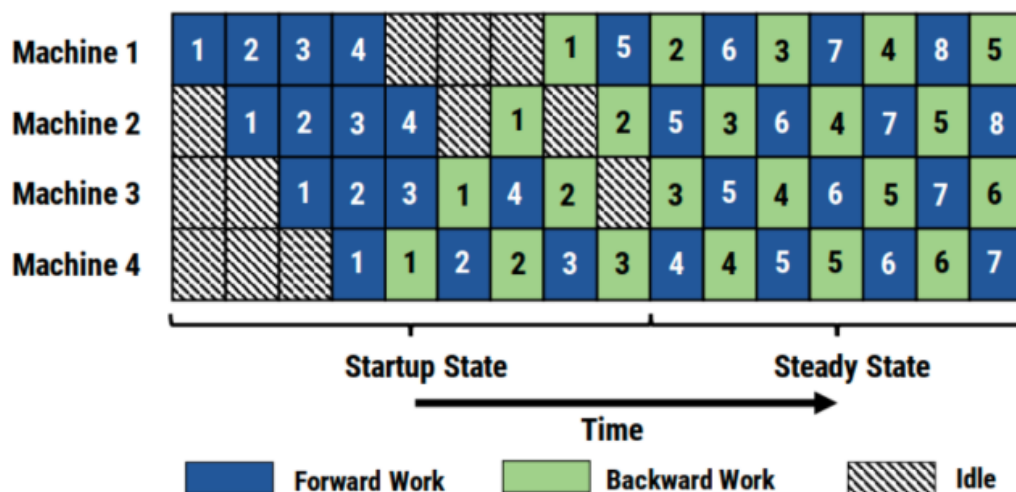


Figure 8: An example pipeline with 4 machines, showing startup and steady states.

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**

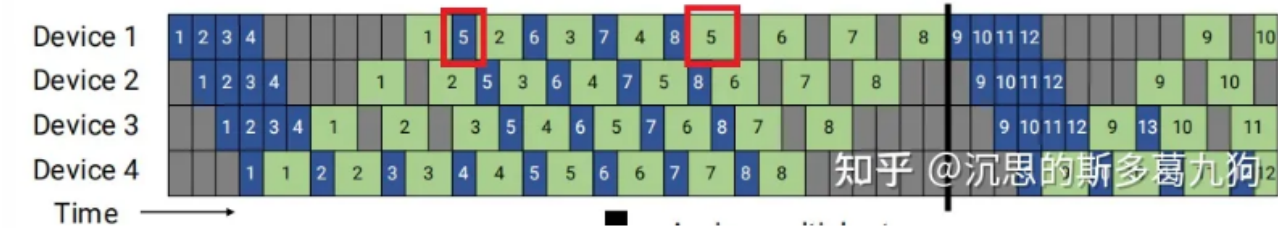
- **Weight stashing（权重暂存）**：为权重维护多个版本，每个 Micro-batch 的前向计算所使用的权重会被暂存，并在其反向计算时复用
 - 具体流程：
 1. **前向计算时**：Machine 1 使用 **当前最新版本的权重** 计算 **Micro-batch 5** 的前向结果，并 **保存该版本的权重**（记为 W_5 ）
 2. **反向计算时**：Machine 1 在计算 **Micro-batch 5** 的反向传播时，**使用之前暂存的 W_5** ，而不是最新的权重
 3. **参数更新**：反向传播完成后，**梯度更新仍然作用于最新版本的权重**（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）

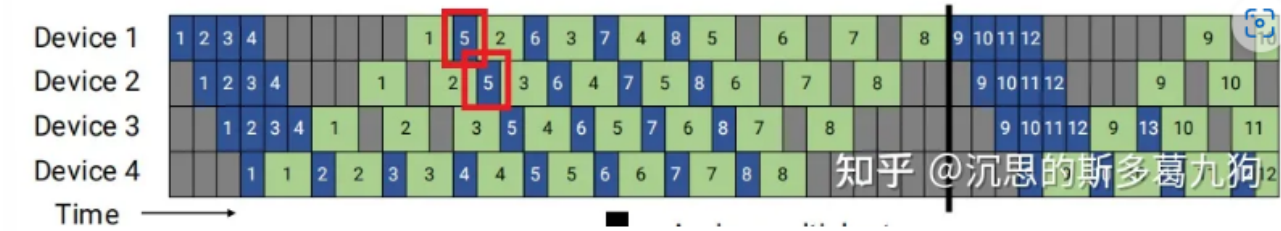


image-20250816005535158

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)

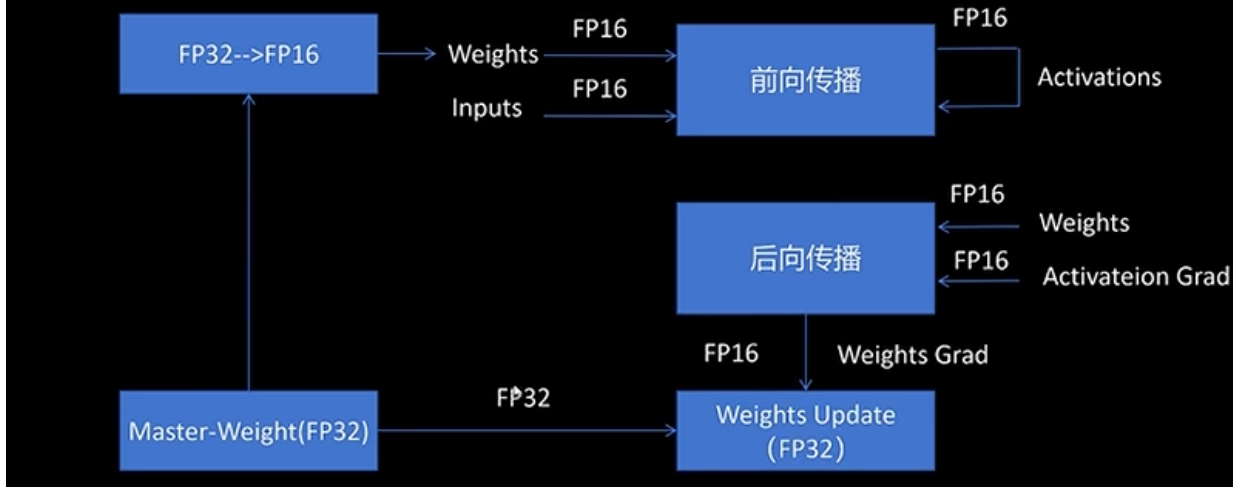


image-20250813120951515

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，可以避免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）

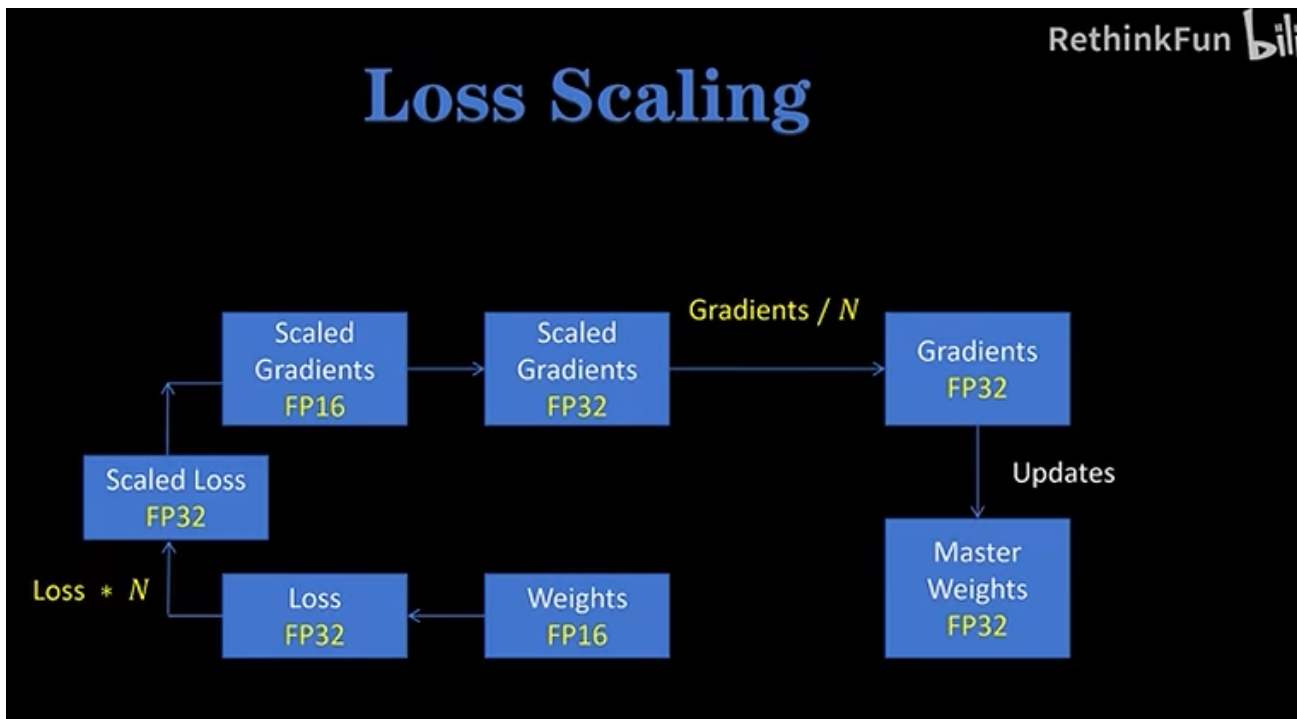


image-20250813121114207

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

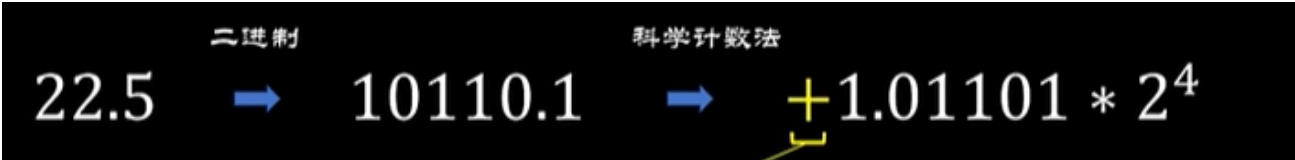


image-20250813115950009

各种精度

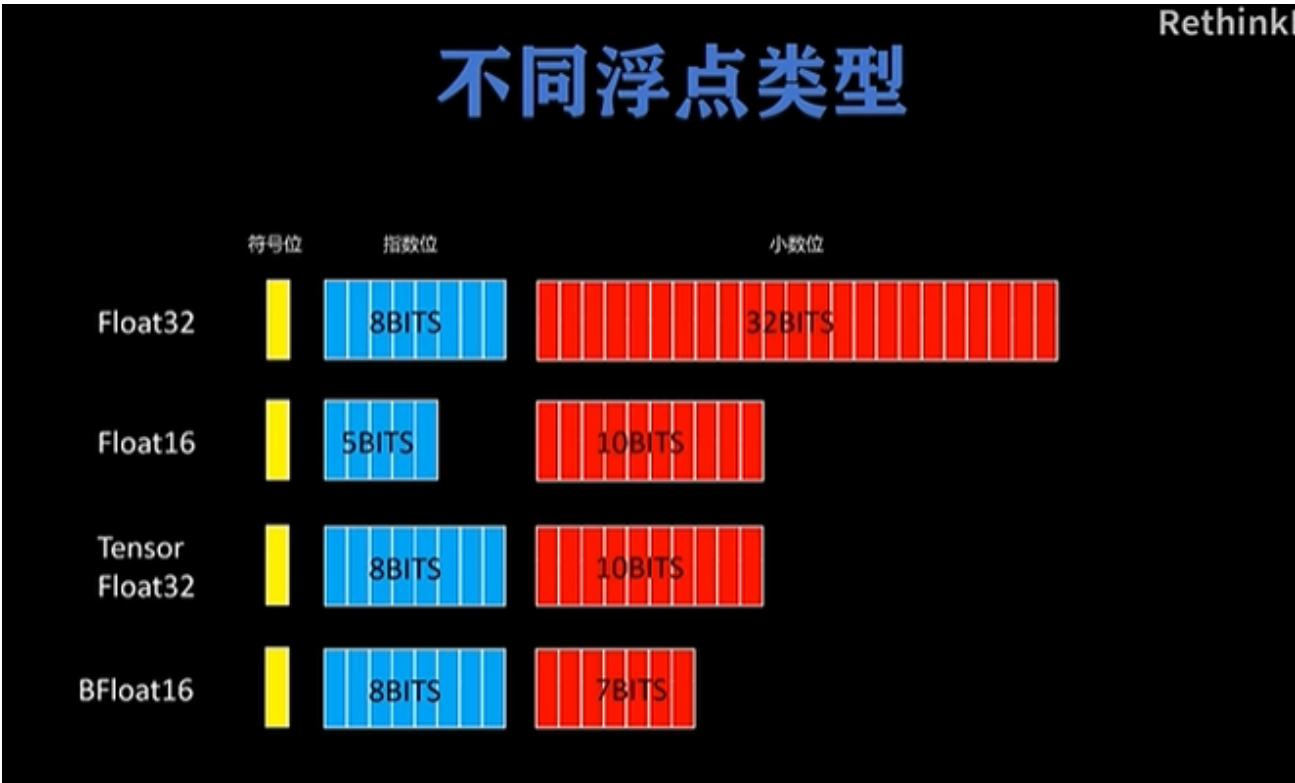


image-20250813115500851

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

$$2048 + 0.5 = 2048$$

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

$$0.5 \quad 1.0 * 2^{-1} \quad 0.00000000000001 * 2^{11}$$

image-20250813115927153

注意力机制变体

MHA、MQA和GQA

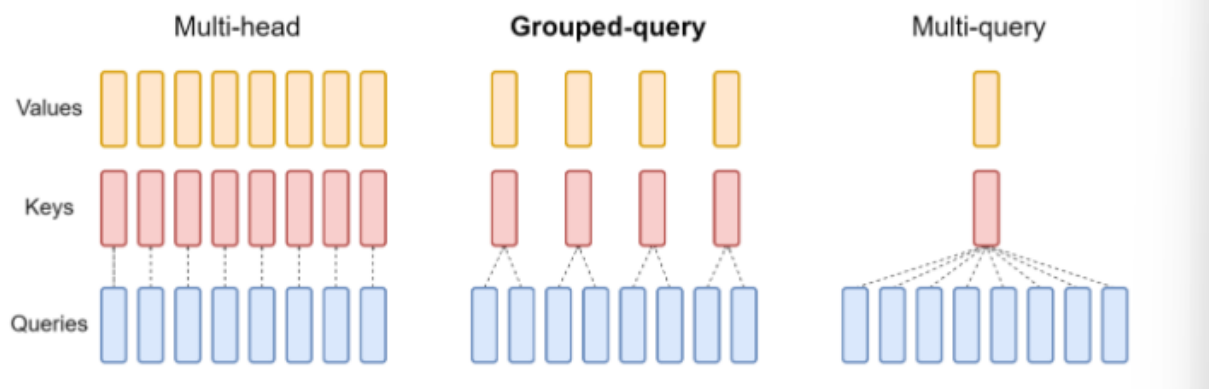


image-20250816120438735

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

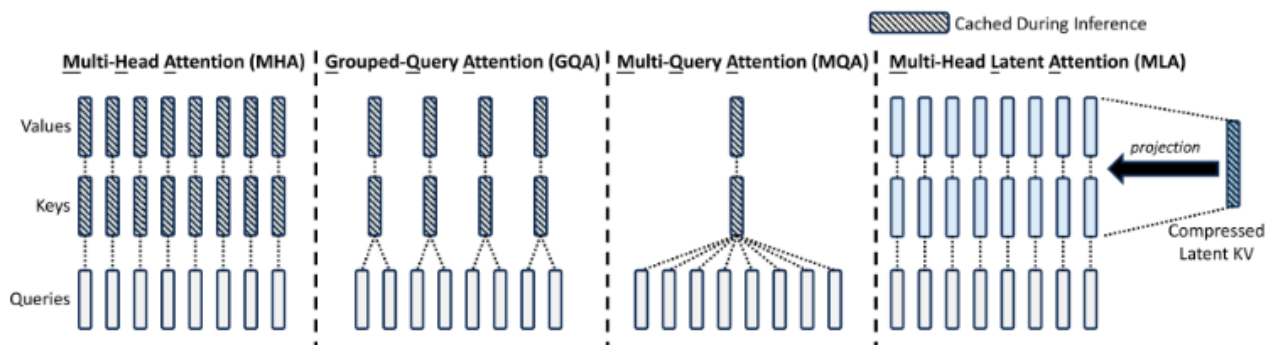


image-20250816120905940

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

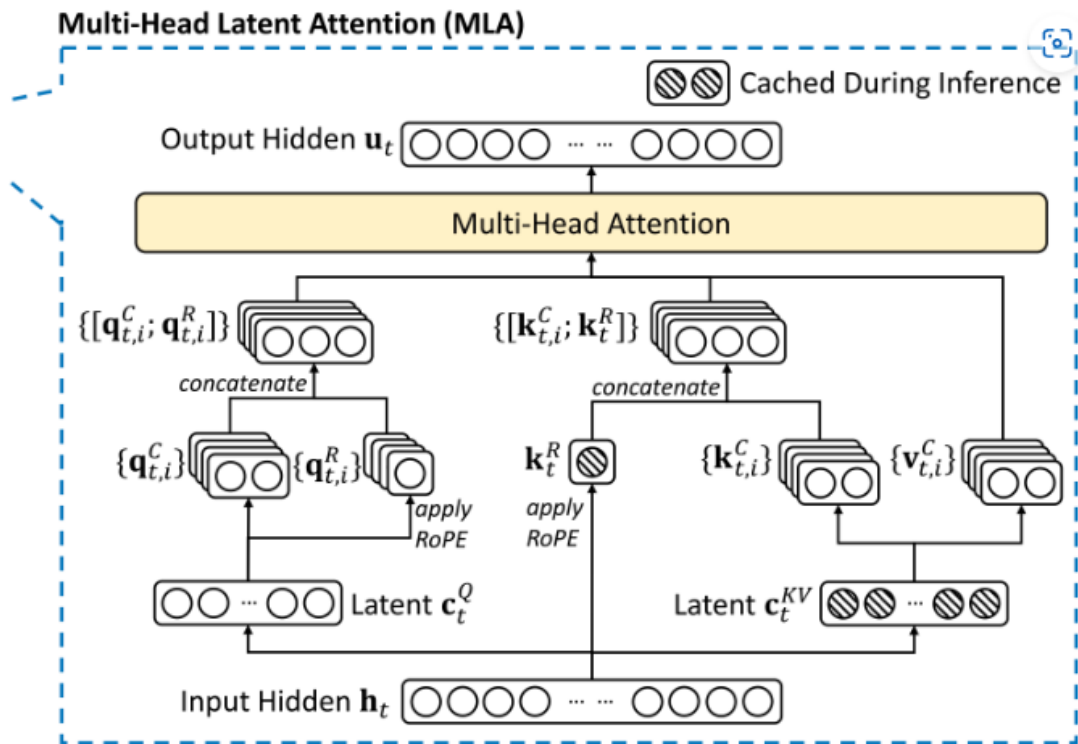


image-20250816131927886

对KV进行联合压缩

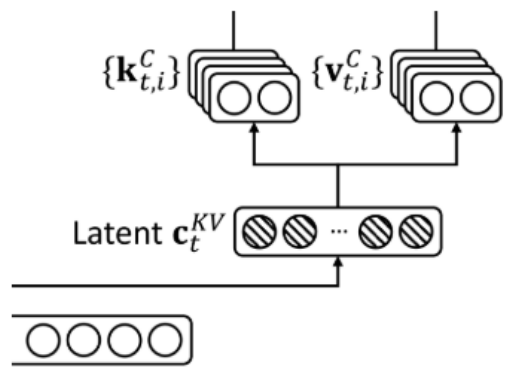


image-20250816133715163

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

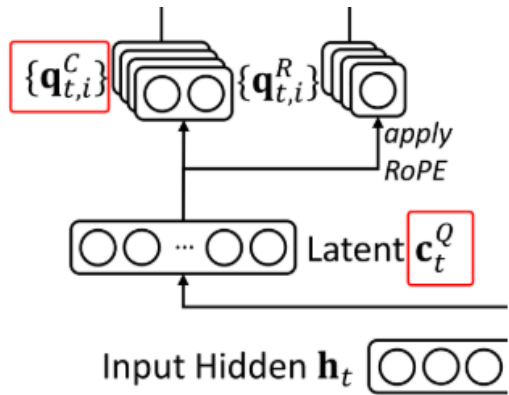


image-20250816135113159

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

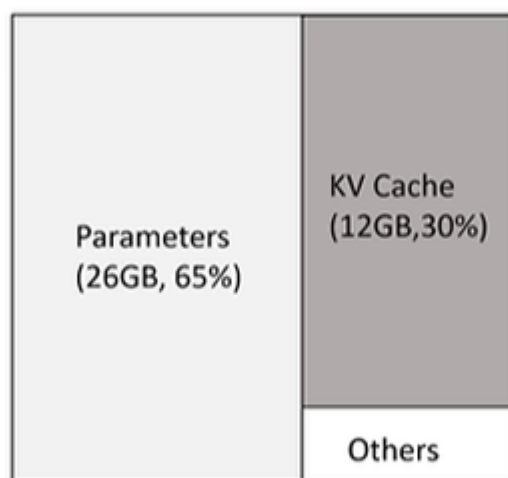
核心思想：将操作系统的内存分页思想引入显存管理，大幅度降低显存占用

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**并发生成序列**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

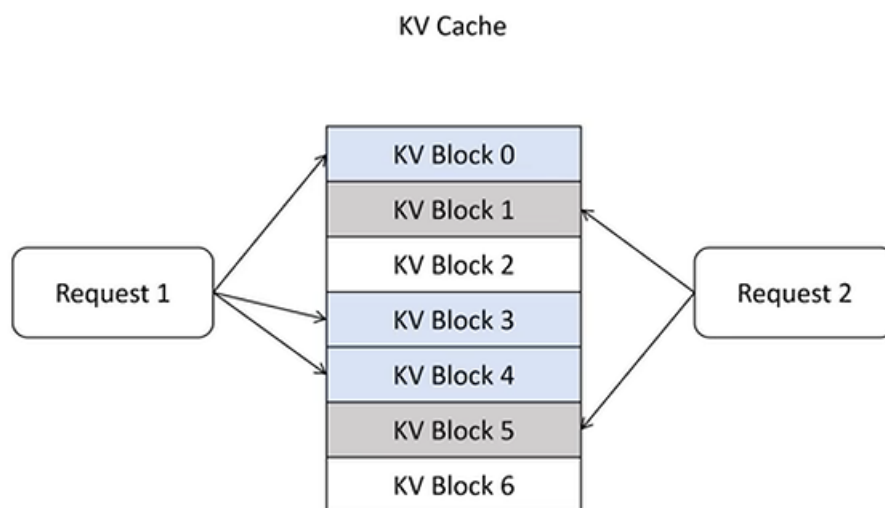


image-20250819121817645

- **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**

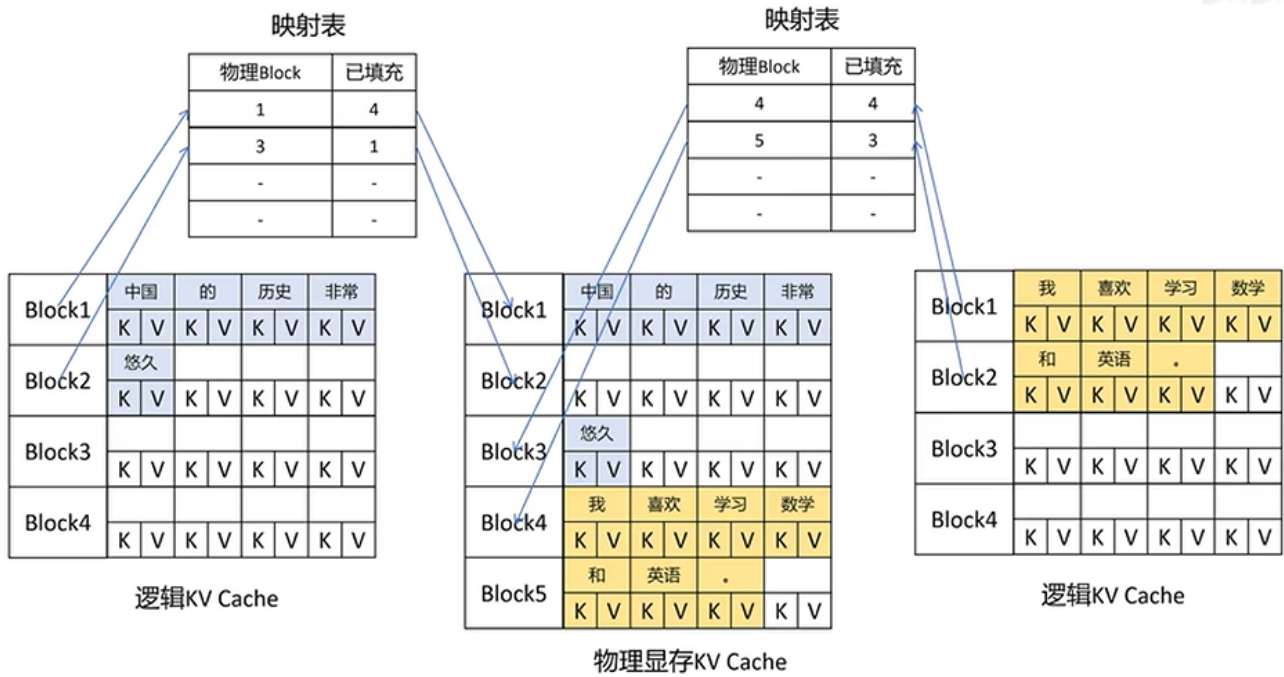


image-20250819121841203

- **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**

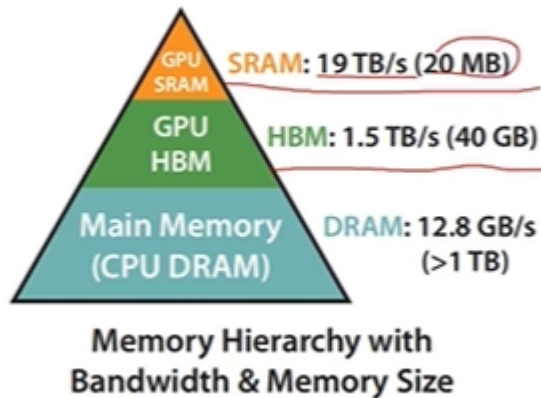


image-20250820134630626

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SRAM
- 计算 $P = \text{softmax}(S)$
- 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

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

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Kernal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

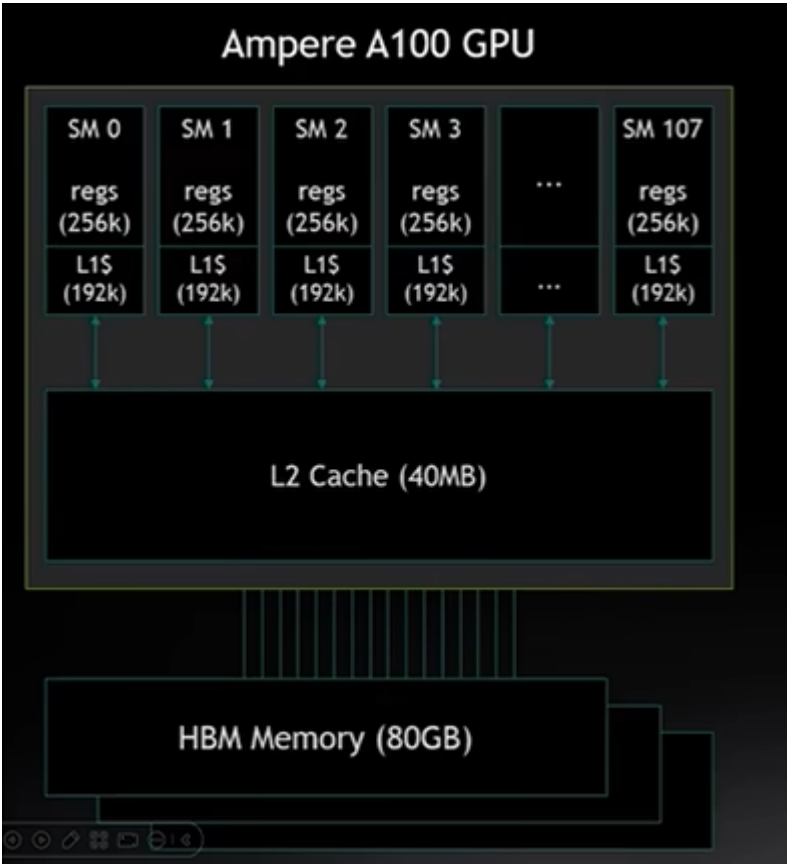


image-20250819141437101

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

Data Location	Bandwidth (GB/sec)
L1 Cache	19,400
L2 Cache	4,000
HBM	1,555
NVLink	300
PCIe	25

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