HW4 - Report 推理和语言模型

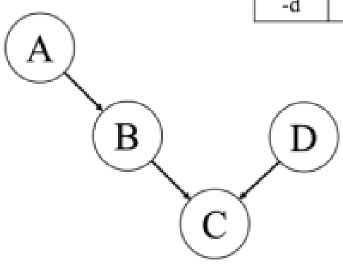
> 曹烨 2021012167 软23 caoye541@gmail.com

T1：贝叶斯网络

> 考虑以下含有 4 个变量 A, B, C, D 的贝叶斯网络。相应的条件概率表如下。
> （a）计算 $p(-a, -b, -c, +d)$ 。
> （b）计算 $p(+b)$ 。
> （c）计算 $p(-a \mid +b)$ 。
> （d）计算并比较 $p(+b)$ 和 $p(+b \mid -d)$ 两者的值是否相等，并从随机变量独立的角度进行解释。
> （e）计算并比较 $p(-a \mid +c)$ 和 $p(-a \mid +c, -d)$ 两者的值是否相等，并从随机变量条件独立的角度进行解释。

$P(A)$	
+a	0.4
-a	0.6

$P(B\|A)$		
+a	+b	0.7
+a	-b	0.3
-a	+b	0.8
-a	-b	0.2



$P(D)$	
+d	0.3
-d	0.7

$P(C\|B,D)$			
+b	+d	+c	0.9
+b	+d	-c	0.1
+b	-d	+c	0.7
+b	-d	-c	0.3
-b	+d	+c	0.4
-b	+d	-c	0.6
-b	-d	+c	0.1
-b	-d	-c	0.9

a.

联合概率分解为：

$$P(-a, -b, -c, +d) = P(-a) \times P(-b| -a) \times P(+d) \times P(-c| -b, +d)$$

将$P(-a) = 0.6, P(+d) = 0.3, P(-b| -a) = 0.2, P(-c| -b, +d) = 0.6$代入可得

$$P(-a, -b, -c, +d) = 0.6 \times 0.2 \times 0.3 \times 0.6 = 0.0216$$

b.

全概率公式可得

$$P(+b) = P(+b|+a)P(+a) + P(+b|-a)P(-a)$$

代入可得：

$$P(+b) = 0.7 \times 0.4 + 0.8 \times 0.6 = 0.76$$

c.

由贝叶斯定理有：

$$P(-a|+b) = P(+b|-a)P(-a)/P(+b)$$

代入可得：

$$P(-a|+b) = (0.8{\times}0.6)/0.76 \approx 0.632$$

d.

$$\begin{aligned} P(+b|-d) &= P(+b|+a,-d)P(+a|-d) + P(+b|-a,-d)P(-a|-d) \\ &= P(+b|+a,-d)P(+a) + P(+b|-a,-d)P(-a) \\ &= 0.7{\times}0.4 + 0.8{\times}0.6 \\ &= 0.76 \end{aligned}$$

由上题可知$P(+b) = 0.76$，可以发现二者相等。

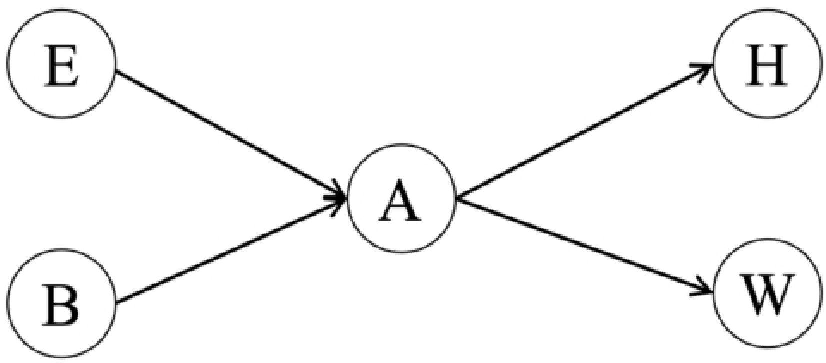
解释：从网络结构可以看出，B和D之间没有直接连接，且它们唯一的公共后代是C。在不观察到C的情况下，B和D是独立的，因此P(+b|-d) = P(+b)。

e.

$$p(-a \mid +c) = \frac{p(-a,+c)}{p(+c)} = \frac{\sum_{bd} P(-a,b,+c,d)}{\sum_{bd}(b,+c,d)} = \frac{\sum_{bd} P(+c \mid b,d)p(d)p(b \mid -a)p(-a)}{\sum_{bd} p(+c \mid b,d)p(b)p(d)} = 0.6219512$$
$$p(-a \mid +c,-d) = \frac{p(-a,+c,-d)}{p(+c,-d)} = \frac{0.2436}{0.3892} = 0.625899$$

解释：可以发现二者的值并不相同。是因为A和D在给定C的条件下不是独立的。虽然A和D在网络中没有直接连接，但它们都是C的父节点，形成了一个"对撞结构"。当我们观察到C时，A和D变得相关，因为关于其中一个变量的信息会影响我们对另一个变量的推断。这就是为什么$P(-a|+c) \neq P(-a|+c,-d)$的原因。

T2：变量消除法

> 在如下图所示的贝叶斯网络中，我们希望通过变量消除法计算 $P(B=b \mid W=w)$ 。初始因子为 $P(e), P(b), P(a \mid b,e), P(h \mid a), P(w \mid a)$ 。
>
> 
>

> （a）假设消除顺序为 $E \to H \to A$ 。请写出每一步产生的新因子的表达式并列出剩余的因子。
> （b）请说明如何使用剩余的因子计算 $P(B=b \mid W=w)$ 。
> （c）因子大小是变量消除法计算复杂度的关键因素。例如，假设所有的变量都是二元变量，则因子 $P(H \mid A)$ 的大小是 2 ，它有 2^2 种取值需要维护；由于 W 已经被观测，因子 $P(W \mid A)$ 的大小是 1 ，它只有 2^1 种取值需要维护。在以上变量消除的过程中，最大的因子是哪个，它有多少种取值需要维护？简要说明若改用顺序 $E \to A \to H$ ，最大中间因子的维度是否会更小、相同或更大，并说明理由。

a.

初始因子： $P(e), P(b), P(a|b,e), P(h|a), P(w|a)$

1. 消除E

- 涉及e的因子：$P(e), P(a|b,e)$
- 新因子：$f_1(a,b) = \sum_e P(e) \cdot P(a|b,e)$
- 剩余因子：$P(b), f_1(a,b), P(h|a), P(w|a)$

2. 消除H

- 涉及h的因子：$P(h|a)$
- 新因子：$f_2(a) = \sum_h P(h|a) = 1$（为1，后续直接忽略）
- 剩余因子：$P(b), f_1(a,b), P(w|a)$

3. 消除A

- 涉及a的因子：$f_1(a,b), P(w|a)$
- 新因子：$f_3(b) = \sum_a f_1(a,b) \cdot P(w|a)$
- 剩余因子：$P(b), f_3(b)$

b.

$$P(B=b \mid W=w) = \frac{P(B=b) \cdot f_3(B=b)}{\sum_{b'} P(B=b') \cdot f_3(B=b')}$$

c.

1. **消除顺序 E → H → A**

初始因子大小为：

- $P(e)$: $2^1 = 2$
- $P(b)$: $2^1 = 2$
- $P(a|b,e)$: $2^3 = 8$
- $P(h|a)$: $2^2 = 4$
- $P(w|a)$: $2^1 = 2$

中间因子大小：

- $f_1(a,b)$: $2^2 = 4$
- $f_2(a)$: $2^1 = 2$
- $f_3(b)$: $2^1 = 2$

综上所述，**最大因子**为 $P(a|b,e)$，大小为8

2. **顺序 E → A → H：**

消除e：$f_1(a,b) = \sum_e P(e) \cdot P(a|b,e)$，大小为4

消除a：$f_2(b) = \sum_a f_1(a,b) \cdot P(h|a) \cdot P(w|a)$，大小为8

综上所述，改顺序后，维度相同，仍然是8

原因分析：这是因为无论哪种顺序，都需要处理包含a,b,e三个变量的初始因子，这决定了最大因子的下界。不同的消除顺序主要影响中间因子的结构，但在这个特定网络中，最大维度保持不变。

T3：朴素贝叶斯

一位心理学家做了一个关于＂幸福＂的调查。每个受访者提供一个向量，其元素 1 或 0 分别对应于他们对某一问题回答＂是＂或＂否＂。该向量的属性为

$$\mathbf{x} = (\text{rich}, \text{married}, \text{healthy}).$$

例如，回答 $(1,0,1)$ 表示受访者＂富有＂、＂未婚＂、＂健康＂。此外，每个受访者如果对自己的生活感到＂满意＂，就给出一个 $y=1$ 的数值；如果＂不满意＂，就给出 $y=0$ 。

心理学家一共收到了 9 份问卷，声称对自己的生活感到＂满意＂的人给出的问卷结果为：

$$(1,1,1),(0,0,1),(1,1,0),(1,0,1);$$

而对于＂不满意＂的人，则是：$(0,0,0),(1,0,0),(0,0,1),(0,1,0),(0,0,0)$ 。
基于以上数据，使用朴素贝叶斯分类器（不带 Laplacian smoothing），
（a）一个＂不富有＂、＂已婚＂、＂健康＂的人感到＂满意＂的概率是多少？
（b）一个＂不富有＂、＂已婚＂的人感到＂满足＂的概率是多少？（也就是说，我们不知道他们是否 ＂健康＂）

a.

对于满意的人有数据：

$$\begin{aligned}
P(x_1=1|y=1)=3/4\\
P(x_1=0|y=1)=1/4\\
P(x_2=1|y=1)=2/4\\
P(x_2=0|y=1)=2/4\\
P(x_3=1|y=1)=3/4\\
P(x_3=0|y=1)=1/4
\end{aligned}$$

对于不满意的人有数据：

$$\begin{aligned}
P(x_1=1|y=0)=3/4\\
P(x_1=0|y=0)=1/4\\
P(x_2=1|y=0)=2/4\\
P(x_2=0|y=0)=2/4\\
P(x_1=1|y=0)=3/4\\
P(x_3=0|y=0)=1/4
\end{aligned}$$

那么有

$$\begin{aligned}
&P(y=1|(0,1,1))\\
&=\frac{p(y=1)p\left(x_1=0 \mid y=1\right)p\left(x_2=1 \mid y=1\right)p\left(x_3=1 \mid y=1\right)}{p(y=1)p\left(x_1=0 \mid y=1\right)p\left(x_2=1 \mid y=1\right)p\left(x_3=1 \mid y=1\right)+p(y=0)p\left(x_1=0 \mid y=0\right)p\left(x_2=1 \mid y=0\right)p\left(x_3=1 \mid y=0\right)}\\
&=\frac{(4/9)\times(1/4)\times(1/2)\times(3/4)}{(5/9)\times(4/5)\times(1/5)\times(1/5)+(4/9)\times(1/4)\times(1/2)\times(3/4)}\\
&=\frac{1/24}{321/5400}\\
&=0.701
\end{aligned}$$

综上，一个＂不富有＂、＂已婚＂、＂健康＂的人感到＂满意＂的概率是0.701

b.

综上所述可以有：

$$\begin{aligned}P(y=1|(0,1,1)) &= \frac{p(y=1)p\left(x_1=0 \mid y=1\right)p\left(x_2=1 \mid y=1\right)}{p(y=1)p\left(x_1=0 \mid y=1\right)p\left(x_2=1 \mid y=1\right)+p(y=0)p\left(x_1=0 \mid y=0\right)p\left(x_2=1 \mid y=0\right)} \\ &= \frac{(4/9)\times(1/4)\times(1/2)}{(5/9)\times(4/5)\times(1/5)+(4/9)\times(1/4)\times(1/2)} \\ &= \frac{1/18}{1/18+4/45} \\ &= 0.385\end{aligned}$$

综上，一个＂不富有＂、＂已婚＂的人感到＂满足＂的概率是0.385

T4：编程题：语言模型

> 在本题中，你将基于简化版本的 GPT 语言模型框架，深入理解语言模型的关键结构模块的实现原理和设计理念。我们已经完成了基础的模型定义，包括嵌入层、位置编码、注意力机制、前馈网络以及残差连接，你需要实现模型中的关键计算模块或替换其中的部分模块。
>
> 注意：本题主要考察代码实现的正确性。如果你的设备性能受限导致训练时间过长，你可以适当调整训练参数以缩短整体训练时间。
>
> ---
>
> #### 4.1. Gradient Accumulation
>
> 在语言模型的训练过程中，使用较大的 batch size 通常有助于提高训练稳定性、减少梯度方差并加速收敛。但在显存有限的条件下，大 batch size 并不总是可行。为此，我们可以采用梯度累积（Gradient Accumulation）技术，通过多次小 batch 的前向－反向传播来模拟大 batch 的效果。设累积步数为 k ，小 batch 的损失函数为 $\mathcal{L}_t$ ，则每次更新的累积损失为：
>
> $$\mathcal{L}_{\text{accum }}=\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathcal{L}_{t+i}$$
>
> 每次更新模型参数时反向传播的梯度为：
>
> $$\nabla \theta=\nabla_\theta\left(\mathcal{L}_{\text{accum }}\right)=\frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \nabla_\theta \mathcal{L}_{t+i}$$
>
> 请你修改现有的训练代码，使其支持梯度累积机制，每隔若干步进行一次模型参数更新，模拟较大 batch size 的效果。
>
> ---
>
> #### 4.2. 实现因果自注意力机制 (Causal Self-Attention)
>
> 你需要手动实现 GPT 模型中的核心计算模块：Causal Multi－Head Self－Attention，不能借助 nn．MultiheadAttention 等已有实现。模块输入特征与维度约定如下：
>
> 令输入为一个三维张量 $X \in \mathbb{R}^{B \times L \times C}$ ，其中 B 为 batch 大小，L 为序列长度，C 为嵌入维度，满足 $C=h \cdot d$ ，即头数乘以每个头的维度大小。计算步骤如下：
>
> **1．QKV 映射（带偏置）：**
>
> 使用一组共享线性变换对输入进行查询 (Q) 、键 (K) 和值 (V) 的映射：
>
> $$Q=X W^Q+b^Q, \quad K=X W^K+b^K, \quad V=X W^V+b^V$$
>
> 其中 $W^Q, W^K, W^V \in \mathbb{R}^{C \times C}, b^Q, b^K, b^V \in \mathbb{R}^C$ 。
>
> **2．重构为多头形式：**
> 将 Q, K, V reshape 为多头表示：
>
> $$Q, K, V \in \mathbb{R}^{B \times h \times L \times d}$$
>
> **3．缩放点积注意力：**

计算注意力得分：

$$A = \frac{QK^{\top}}{\sqrt{d}} \in \mathbb{R}^{B \times h \times L \times L}$$

4．应用 Causal Mask：

使用下三角掩码 $\mathbf{M} \in \{0,1\}^{L \times L}$ 限制未来信息访问，确保模型生成过程只依赖于过去的信息：

$$A_{i,j} = \begin{cases} A_{i,j}, & \text{if } j \leq i \\ -\infty, & \text{if } j > i \end{cases}$$

5．使用 Softmax 归一化注意力得分：

$$A = \operatorname{Softmax}(A) \in \mathbb{R}^{B \times h \times L \times L}$$

6．上下文表示计算：

将注意力得分与值向量加权求和：

$$Z = AV \in \mathbb{R}^{B \times h \times L \times d}$$

7．头合并与线性投影：

将所有头拼接在一起，并使用一个线性层将张量映射回原始维度：

$$Y = \operatorname{Concat}\left(Z_1, \ldots, Z_h\right) W^O + b^O \in \mathbb{R}^{B \times L \times C}$$

其中 $W^O \in \mathbb{R}^{C \times C}, b^O \in \mathbb{R}^C$ 。

你需要依照上述计算流程，补全 CausalSelfAttention 类的代码。实现要求：

- 使用 torch．matmul 或@运算符完成注意力机制的计算。
- 手动构造 causal mask（可调用 torch．tril）。

使用补全后的代码进行模型训练，汇报训练过程中 Training Loss 和 Val Loss 的变化过程。

4.3. 位置编码的实现与对比

在我们提供的代码中，使用了可学习的位置编码（nn．Embedding）。近年来，旋转位置编码（Rotary Positional Embedding，RoPE）作为一种结构更为精巧的相对位置编码方法被广泛采用，尤其在 LLaMA 等模型架构中表现良好。在本题中，你需要实现使用 RoPE 作为位置编码的 Transformer 模型进行训练，并汇报 Training Loss 和 Val Loss 的变化过程。

RoPE 的形式化定义如下：给定一对输入向量 $x = [x_0, x_1, \ldots, x_{d-1}] \in \mathbb{R}^d$ ，设维度 d 为偶数，将其视为 $d/2$ 个二维向量对：

$$\mathbf{x}^{(i)} = \begin{bmatrix} x_{2i} \\ x_{2i+1} \end{bmatrix} \quad \text{for } i = 0, 1, \ldots, \frac{d}{2} - 1$$

对于第 i 对位置向量，在位置 p 上定义旋转频率参数：

$$\theta_i = \frac{1}{10000^{2i/d}}$$

对应的二维旋转矩阵为：

$$R\left(p, \theta_i\right) = \begin{bmatrix} \cos\left(p \cdot \theta_i\right) & -\sin\left(p \cdot \theta_i\right) \\ \sin\left(p \cdot \theta_i\right) & \cos\left(p \cdot \theta_i\right) \end{bmatrix}$$

将每个二维向量应用该旋转操作：

$$\mathbf{x}_p^{(i)} = R\left(p, \theta_i\right) \cdot \mathbf{x}^{(i)}$$

最终，位置编码后的向量 x_p' 为各个旋转结果拼接而成：

$$x_p' = \left[\mathbf{x}_p^{(0)}; \mathbf{x}_p^{(1)}; \ldots; \mathbf{x}_p^{(d/2-1)}\right]$$

对于注意力机制中的 $Q, K \in \mathbb{R}^{B \times h \times L \times d}$ ，将上述旋转分别应用于每个位置 $p \in \{0, \ldots, T-1\}$上的表示。 V 不做变换。

> 注意力权重仍然按以下方式计算：
>
> $$\text{Attention}(Q,K,V) = \text{Softmax}\left(\frac{Q'K'^T}{\sqrt{d}}\right)V$$
>
> 其中 Q', K' 是经过 RoPE 旋转的位置相关表示。
> 请实现使用 RoPE 作为位置编码的模型，并汇报 Training Loss 和 Val Loss 的变化过程。注意，在该模型中，原本的位置编码需要被移除，且 RoPE 的实现应当被集成在 CausalSelfAttention类的实现中。
>
> ---
>
> ##### 4.4. 实现语言模型的采样函数
>
> 在我们给出的代码中，已经实现了语言模型的 top－k 采样策略，即每次生成新的 token 时，从概率大小前 k 的 token 中进行采样。还有一种所谓的 top－p 采样策略，每次只从累积概率超过阈值 p 的最小单词集合中进行随机采样。其形式化定义如下。
>
> 设当前时刻模型输出的 token 概率分布为：
>
> $$P = \text{Softmax}(z) \in \mathbb{R}^{|V|}$$
>
> 其中 $z \in \mathbb{R}^{|V|}$ 是 logits 向量，$|V|$ 是词表大小。
>
> 我们将所有 token 按概率从大到小排序，记排序后 token 的索引为：
>
> $$\pi = \text{argsort}(P), \quad \text{使得 } P_{\pi_1} \geq P_{\pi_2} \geq \cdots \geq P_{\pi_{|V|}}$$
>
> 选取最小的前 k 个 token，使得它们的概率累计和不小于阈值 p：
>
> $$\sum_{i=1}^{k} P_{\pi_i} \geq p, \quad \text{且} \quad \sum_{i=1}^{k-1} P_{\pi_i} < p$$
>
> 最终仅在这些 token 上归一化进行采样：
>
> $$\hat{P}_i = \begin{cases} \frac{P_i}{\sum_{j\in S} P_j}, & i \in S \\ 0, & i \notin S \end{cases} \quad \text{其中 } S = \{\pi_1, \ldots, \pi_k\}$$
>
> 请参考现有模型中的 generate 函数，实现使用 top－p 策略的采样函数，并在报告中附上使用两种策略生成的文本片段。

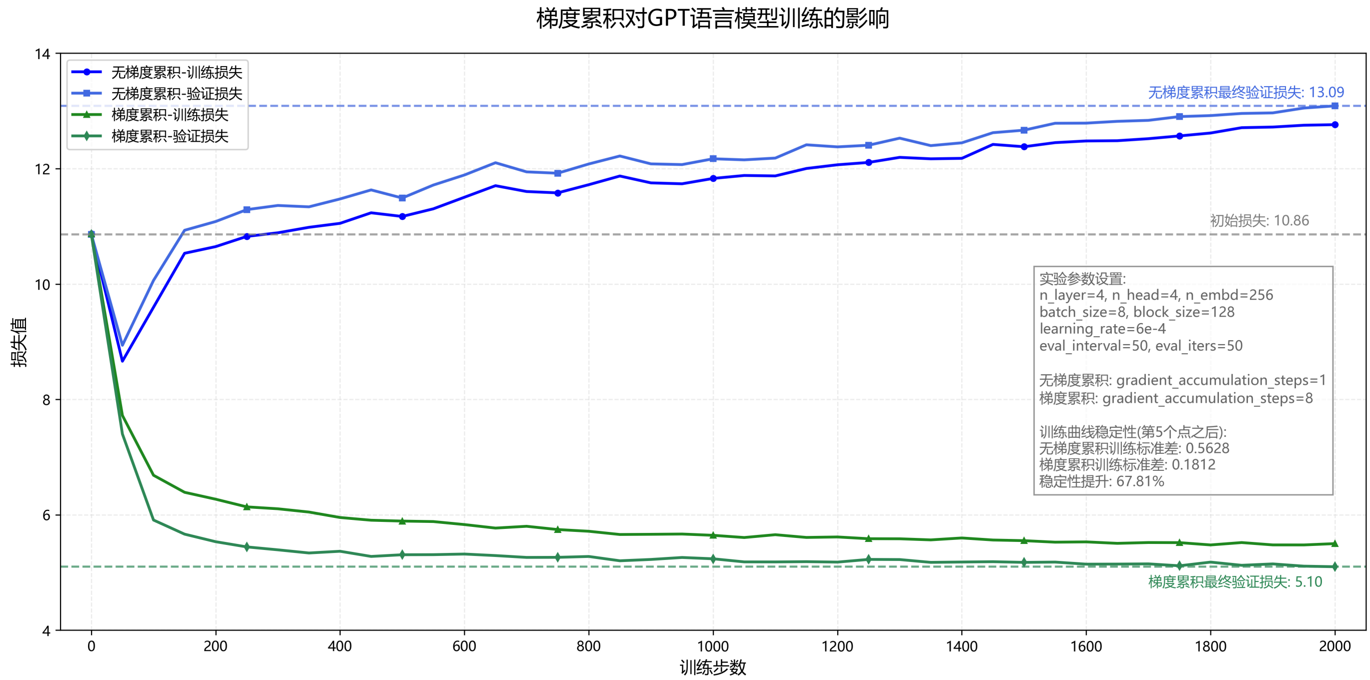
4.1 Gradient Accumulation

完成了代码，并设计了对比试验

【naive组】：gradient_accumulation_steps = 1

【Gradient Accumulation 组】：gradient_accumulation_steps = 8

实验结果如下：



就实验结果可以看到：

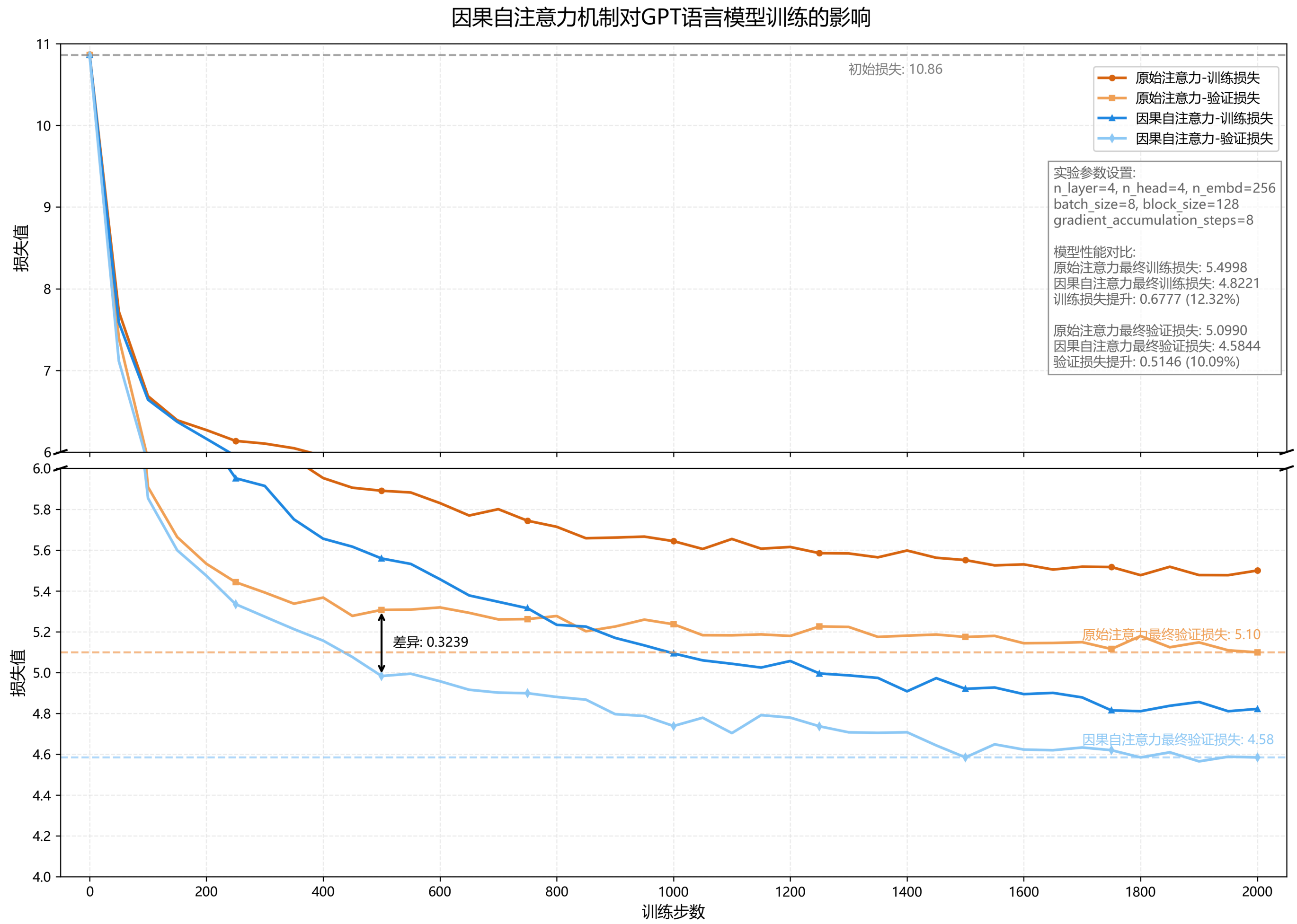
- 梯度累积组的loss逐渐下降并且收敛，naive版本甚至直接飞了
- 再第五个点（250步）之后，对比标准差，梯度累积组的标准差更小，提升了67%的训练稳定性

4.2 实现因果自注意力机制 (Causal Self-Attention)

完成了代码，并设计了对比实验

【naive组】：没有带因果自注意力机制

【CSA 组】：实现了因果自注意力机制



就实验结果可以看到：

- 对比到2000步的最终val loss，可以看到实验组的loss相较于对照组从5.099降低到了4.584，整体的val loss效果优化了10.09%；同时train loss 也优化了12.32%
- 也可以看到CSA组的训练过程更稳定，收敛曲线更平滑
- 以及训练集和验证集的提升比例接近，说明改进是没有过拟合的
- 总的来说，我们的结果验证了因果自注意力机制的有效性

4.3 位置编码的实现与对比

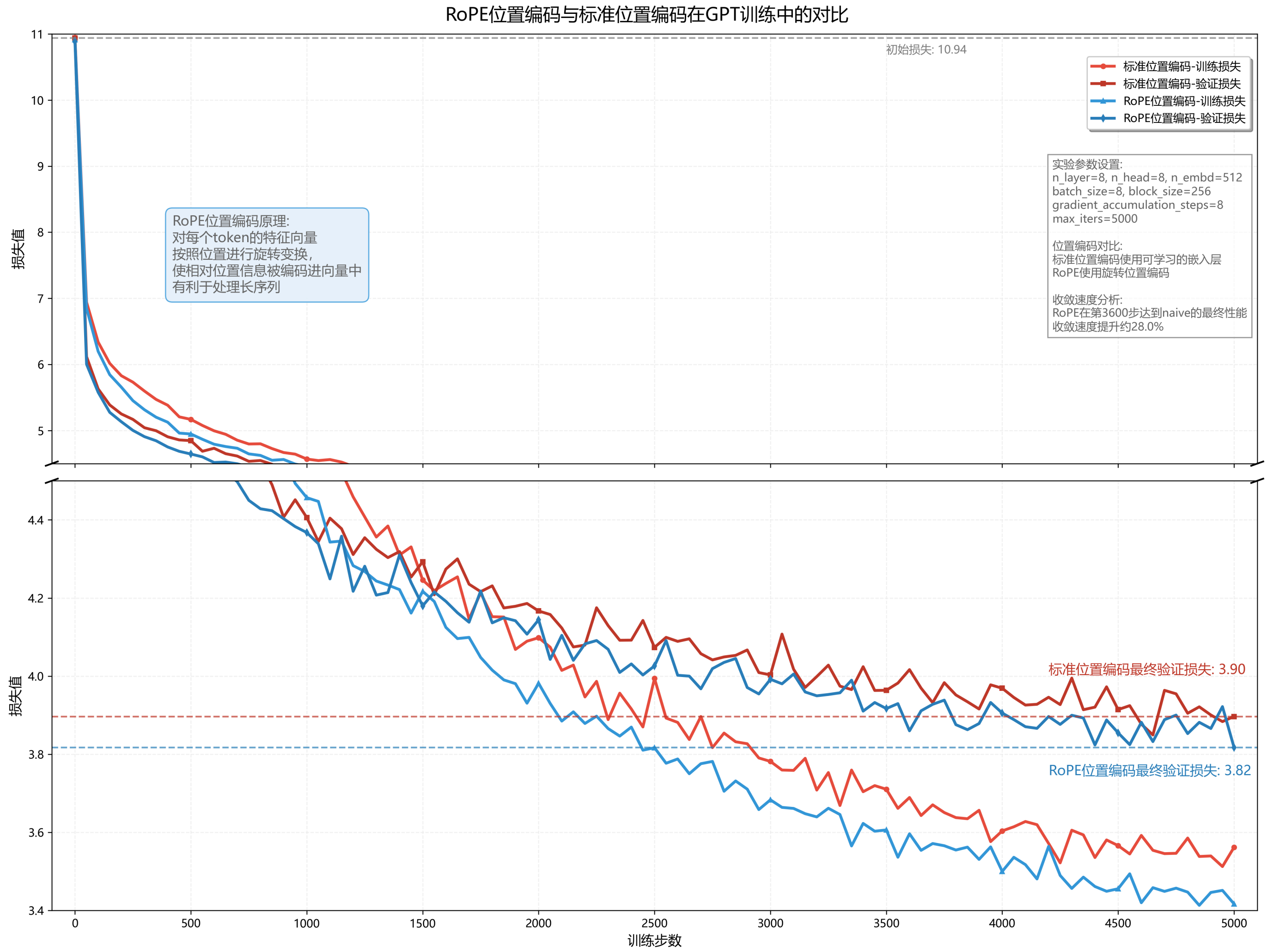
完成了代码，并设计了对比实验

【naive组】：原始的model模型

【RoPE 组】：实现了位置编码的model_RoPE模型

同时，因为RoPE在长序列中优势更明显，我增大了很多参数并且将步数从2000提升到了5000

实验结果如下



就实验结果可以看到：

- RoPE在第3600步左右就达到了标准位置编码的最终性能，收敛速度提升了约28.0%
- RoPE组的曲线震荡程度较小，说明训练稳定性良好
- 对比5000步的最终性能，RoPE也有一定优势
- 总的来说，RoPE有一定的优化，但是优势不是很明显