作业 3：深度学习

清华大学软件学院
人工智能导论, 2025 年春季学期

介绍

本次作业需要提交说明文档（PDF 形式）和 Python 的源代码。注意事项如下：

- 本次作业满分为 100 分，附加题 5 分，得分超过 100 分按 100 分记。
- 除简答题、编程题外的题目，请给出必要的解答过程，只有答案且过于简略的回答会酌情扣除一定分数。题目要求直接回答或只汇报结果的题目，则不需要给出过程或分析。
- **请不要使用他人的作业，也不要向他人公开自己的作业，复制网上内容须在报告中说明**，否则将受到严厉处罚，作业分数扣至-100（即倒扣本次作业的全部分值）。
- 完成作业过程中，如果使用了大模型辅助（如润色文笔、询问知识点等），请在作业末尾声明使用的方式和程度（不影响作业评分）。**禁止直接粘贴大模型输出的文本**，否则会扣除一定的作业分数。
- 统一文件的命名：`{学号}_{姓名}_hw3.zip`。**所有解答和实验报告请写在一个 pdf 文件中**，和代码一起压缩上传。

1 简答题（15 分）

1. 什么是交叉熵（Cross Entropy）？在学习一个类别分布（Categorical Distribution）时，使用交叉熵作为损失函数比绝对值损失函数（Absolute Error，$L_{abs} = |y_i - \hat{y}_i|$）有什么好处？
2. 多层感知机（Multilayer Perceptron）相比线性模型有哪些优势？相较于训练浅而宽的神经网络（“宽度学习”），训练相对窄而深的神经网络有什么好处？
3. 卷积（Convolution）和互相关（Cross-correlation）分别是什么意思？在卷积神经网络中，卷积核通常进行的是卷积还是互相关操作？
4. 批量大小（Batch Size）对于优化器（比如随机梯度下降）影响巨大。为了减小现存占用，小宣提出将每次前向传播的批量大小减半，梯度累积两次再进行反向传播。请问这种方法能确保训练得到的模型效果参数一致吗（假设随机状态、batch 划分、dropout 的神经元相同）？若有影响，请指出原因（例如优化器、模型中的某些层）；若无影响，请论证。
5. 为什么说残差连接（Residual Connection）有利于训练更深层的深度网络？残差链接能够缓

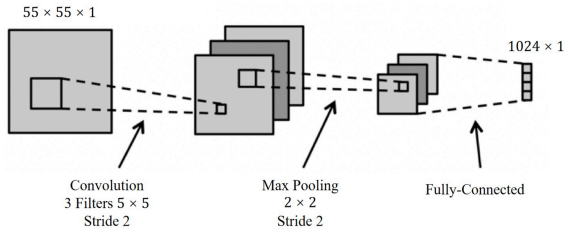
解梯度消失（Gradient Vanishing）的问题吗?

2 解答题

2.1 卷积神经网络（10 分）

一个卷积神经网络的前向传播过程如下图所示，它依次通过以下各层将一张尺寸为 $55 \times 55 \times 1$ 的单通道图片转换为 1024×1 的输出：卷积层（Convolution）、最大池化层（Max Pooling）、ReLU 、全连接层（各层参数已在图中列示），且在该网络中，我们将不使用任何偏置参数（Bias Parameters）。则对于该网络：

1. 卷积层共有多少个可学习参数?
2. 最大池化层的输出的尺寸为多少?
3. 在前向传播过程中，对于每个样本需要进行多少次 ReLU 函数计算
4. 为了给模型加入非线性，需要在网络中加入激活函数，请列举两个激活函数。



2.2 注意力机制（25 分）

本题中我们将探究利用 GPT 类架构进行机器翻译过程中的注意力机制计算过程。

假设我们想要翻译“他 | 喜欢 | 苹果”这一中文句子（3 个 token 使用竖线分隔），在 GPT 的某一自注意力层中 3 个 token 的 query、key、value 向量分别记作 $Q = \{q_1, ..., q_3\}$, $K = \{k_1, ..., k_3\}$, $V = \{v_1, ..., v_3\}, q_i, k_i, v_i \in \mathbf{R}^d$。

1. 请写出经过带掩码的自注意力层

$$Y = \text{Attention}(Q, K, V) = \text{Softmax}\left(\frac{QK^T}{\sqrt{d}}\right)V$$

之后每个 token 对应的输出 yi 的表达式。（注意以上公式中省略了掩码）

2. 设 $d = 4$, $K = \left\{ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \right\}$。当 GPT 模型预测翻译的第一个 token（英文单词）“He” 的时候，它应该需要尽量多的来自 token “他” 的信息。请写出向量 q_3 的一个取值，满足 q_3 的 2 范数不超过 1，且与第一个 token 的自注意力权重（相比别的 token）最大，并写出此时 y_3 关于 v_1, v_2, v_3 的表达式。
3. 设生成了 token “He” 之后，计算到这一层时，$k_4 = (-1, 0, -1, -1)^T$。当 GPT 模型预测翻译的第二个 token（英文单词）“likes” 的时候，它同时需要 “喜欢” 和 “He” 的信息（因为

"likes" 是第三人称单数形式），此时多头自注意力机制可以胜任。假设以 query，key，value 向量的前两维和后两维作为两个自注意力头（Heads）的特征向量，请写出向量 q_4 的一个取值，满足 q_4 的 2 范数不超过 1，且在第一个自注意力头中与第二个 token（"喜欢"）的自注意力权重（相比别的 token）最大，在第二个自注意力头中与第四个 token（"He"）的自注意力权重最大，并写出此时 y_4 的表达式。

2.3 [附加题] 感知机的收敛保证（5pt）

在课程中，我们讲解了感知机 (Perceptron)，一个经典的学习算法。下面，让我们考虑感知机对于-1,1 分类任务下的收敛保障。具体来讲，在这种设定下，我们有数据集 $\mathcal{D} = \{(x, y), x \in \mathbb{R}^d, y \in \pm 1\}$，我们希望学习一组参数 $w \in \mathbb{R}^d$，对于数据 x 的标签 y 进行预测：$f(x) = \text{sign}(w^\intercal x)$。在此设定下，感知机算法如下：

Algorithm 1: Perceptron Learning Algorithm

$P \leftarrow$ inputs with label 1
$N \leftarrow$ inputs with label -1
Initialize w randomly
while not Convergence **do**
    Pick random $x \in P \cup N$
    If $x \in P$ and $w^\intercal x < 0$ **then**
        $w = w + x$
    end if
    If $x \in N$ and $w^\intercal x \geq 0$ **then**
        $w = w - x$
    end if
end while

下面，请证明：

若有 $\forall i \in |\mathcal{D}|, ||x_i|| < 1, \exists w^* \in \mathbb{R}^d, \gamma > 0, s.t. ||w^*|| = 1, \forall (x_i, y_i) \in \mathcal{D}, y_i w^{*\intercal} x_i > \gamma$ (即存在一个过原点的划分平面，有安全距离 γ)。该算法收敛前最多触发 $\frac{1}{\gamma^2}$ 次预测错误。

3 深度学习与 AlphaZero（50 分）

问题背景 在之前的作业中，我们实现了 AlphaZero 的训练流程，并尝试用线性模型学习围棋的策略和价值函数。但是，简单的线性模型并不足以建模复杂的围棋问题，我们需要引入深度神经网络来解决围棋问题。

任务目标 本次作业中，我们将继续在 7×7 围棋问题上探索 AlphaZero 算法的能力。下发的代码文件中，已经实现了一个简单的全连接网络的示例（`model/example_net.py:MLPNet`，你需要先利用示例网络运行 AlphaZero 训练，然后参考示例网络，自己设计并实现一个深度网络，测试训练效果。**提交时请删除 `*.so`、`*.pyd` 和 `*/build/`等临时文件和训练过程的 ckeckpoint，仅提交代码和 1 个最好的模型参数文件**，本题的文字报告请和其他题目写在同一个文档中提交。

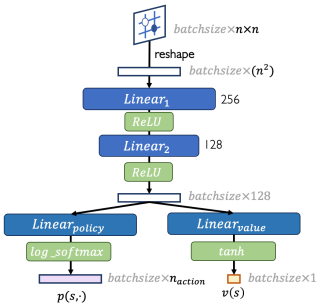
1. 将之前作业中完成的代码填入对应位置，运行训练，并汇报使用 MLP 模型的 AlphaZero 算法训练过程中对 Random Player 的胜率，和训练过程的 elo 分数曲线图。
2. 参考示例代码，设计并实现一个不一样的深度模型，要求至少需要使用一个卷积层处理二维棋盘特征。请绘制网络结构图，并简要说明设计的理由。
3. 使用自己设计的深度模型，运行训练，并汇报训练过程中 AlphaZero 算法对 Random Player 的胜率以及 elo 分数曲线图。要求训练过程中，对 *Random Player* 的胜率至少有一次不低于 90%。
4. 修改 `pit_puct_mcts.py`，加载训练后的 MLP 模型和自己设计的模型进行对弈，汇报对局的胜率。

参数选择　完成上述题目时，可以自由选择适合你的情况的参数进行训练，但过于不合理的参数设置可能会导致扣分（若报告未说明实验使用的参数，则会以提交的代码为准）。

文件大小限制　**提交的模型参数文件大小不能大于 32MB**，且只能提交 1 个你认为效果最好的模型参数文件（有特殊情况请与助教提前沟通）。

提示

- 在 `model/example_net.py` 中预留了一个 `MyNet` 类用于实现你自己设计的深度模型。你也可以将其重命名为合适的名字。
- 模型设计不是越复杂越好，过于复杂或者参数量过大的模型可能导致训练缓慢、容易过拟合。
- 卷积层的实现你可能会用到 `torch.nn.Conv2D`[1]和 `torch.nn.BatchNorm2D`[2]。
- 推荐使用并行脚本（`alphazero_parallel.py`）进行训练，并根据实验环境实际情况，使用合适并行数（主函数中 `N_WORKER` 变量控制）。训练时间可能较长，建议提前评估合理安排。
- 本次作业下发的训练脚本**默认会覆盖同一保存路径下的文件**，训练时请做好备份，或确保使用了不同的保存路径。
- 请确保前两次作业涉及的代码实现正确。尽管前两次作业的内容不在本次作业考察的范围内，但是错误的实现可能导致异常的训练结果。你可以参考已发布的优秀作业，检查自己代码中的问题。
- 示例的 MLP 模型的网络结构图参考：



[1] `https://pytorch.org/docs/stable/generated/torch.nn.Conv2d.html`

[2] `https://pytorch.org/docs/stable/generated/torch.nn.BatchNorm2d.html`

4 提交格式

- 请先删除 `*.so` `*.pyd` 等文件和环境目录下的 `build` 文件夹，再将你的代码目录内**所有代码文件**、**1 个最好的模型参数文件**和你的**文字报告**打包提交。
  统一文件的命名：`{学号}_{姓名}_hw3.zip`。
- 请将本次作业所有问题回答写在同一份报告中，报告请导出为 **pdf 格式**。