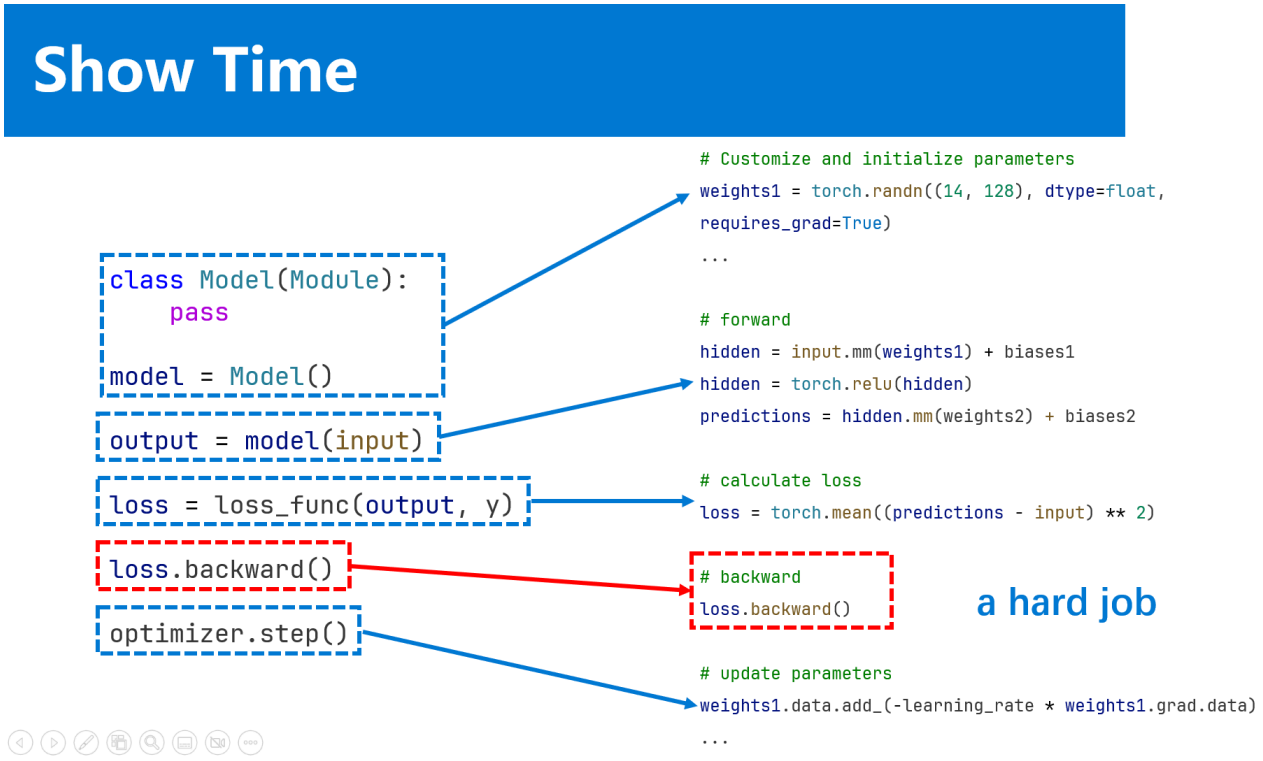
PyCarrot 机器学习框架

前言

笔者的研究方向是人工智能。在研究生第一学期，笔者学习了《机器学习》这门课程。在学习过程中，笔者接触到了深度学习框架 `PyTorch`。`PyTorch` 使得深度学习的整个过程变得非常简便，开发者无需关注框架的底层细节，而可以专注于数据科学本身。

在学习搭建神经网络的过程中，笔者深入了解了深度学习中最重要的算法之一——反向传播算法。反向传播算法不仅是深度学习的核心，也是推动其快速发展的关键因素。

随后，在《高级算法设计》课程中，笔者亲自实现了反向传播算法，并在课堂上进行了分享。



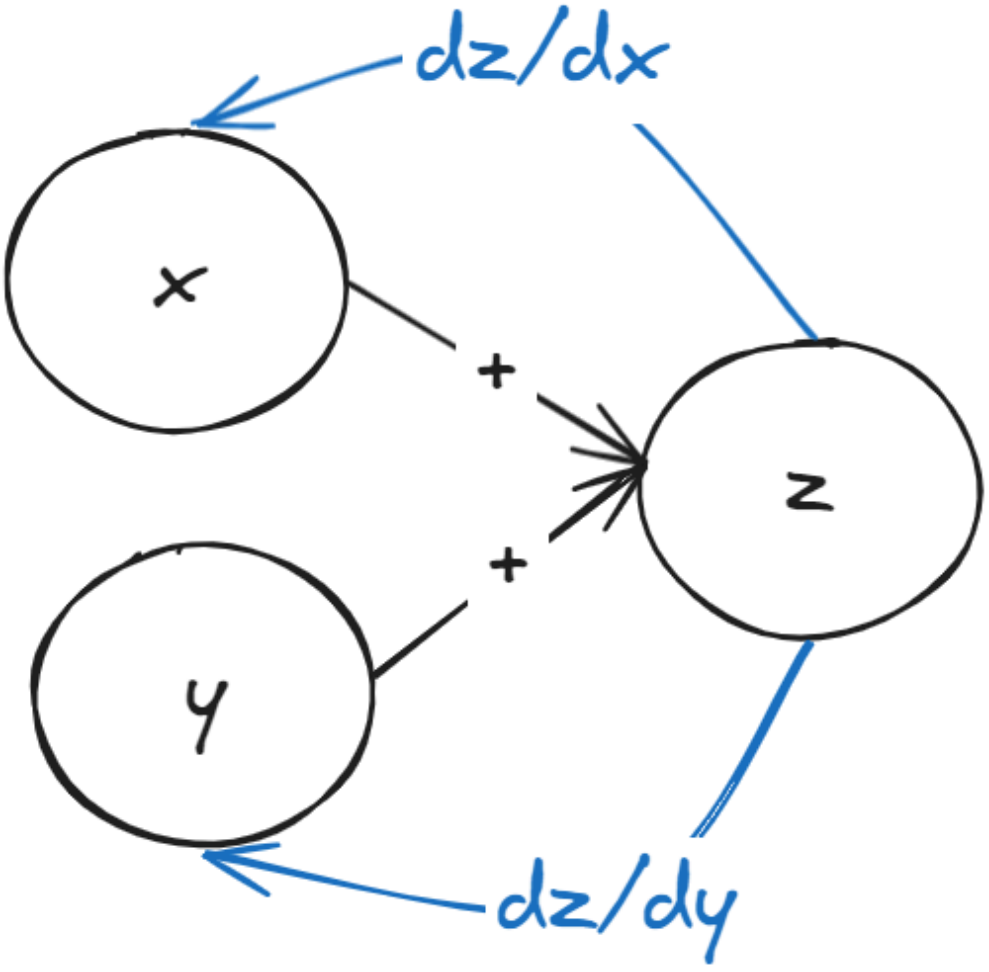
在成功实现了深度学习的核心——反向传播算法之后，笔者基于此算法构建了一个名为 `PyCarrot` 的机器学习框架。该框架的命名来源于笔者的英文名 `CarrotWu`，因此将其命名为 `PyCarrot`。

反向传播算法（自动微分）

反向传播算法的介绍

反向传播的是在动微分在工程上的实现。其本质就是利用链式求导法则，从计算结果开始，将微分反向传播到各个计算节点（如`PyTorch`中的`Tensor`数据类型）。接着使用梯度对各个参数节点进行更新（优化算法），经过这样的过程，我们的模型在特定数据上会呈现`optimum`。

以表达式`z = x + y`为例：



反向传播算法的实现

常量版本（不涉及矩阵运算）

知识铺垫

在`Pytorch`中`Tensor`数据类型构建了反向传播算法的基础。因为`Tensor class`不仅存储着数据本身，还存储着**如何传递梯度?** 的信息。

主要就是一下两个字段：

1. `self.grad`：节点的梯度信息。
2. `self.grad_func`：节点的梯度该如何传递到子节点，即计算子节点的梯度的函数（数学上的链式法则）。

```
class Tensor(object):
    self.data
    self.grad
    self.grad_func
    ...
```

以表达式`z = x * y`为例，我们来说明一下上面两个字段。

假设计算节点`z`的`grad=a`，而`z`由计算节点`x`和`y`进行乘法运算得到，那么`z`的`grad_func`就存储着`z`的`grad`如何传递给`x`和`y`传递方式。所以`grad_func=[(x, grad_wrt_x), (y, grad_wrt_y)]`。

`grad_wrt_x`用数学表示是这样：

$$\frac{\partial z}{\partial x} = a * y$$

`grad_wrt_y`用数学表示是这样：

$$\frac{\partial z}{\partial y} = a * x$$

用`Python`代码实现是下面这样：

```
def grad_wrt_x(grad):
    return grad*y

def grad_wrt_y(grad):
    return grad*x
```

代码实现

下面是`Carrot`类的实现：

首先是`Carrot`类的一些属性

```
class Carrot():
    def __init(self, data, requires_grad=False,
child_nodes=[], name=None)
        self.data = data # Carrot实例中所存储的数据
        self.child_nodes = child_nodes # 子节点信息，相当于
Tensor中的grad_func，其值默认为空
        self.name = name # 节点的标识信息
        self.grad = None # 节点的梯度
        self.requires_grad = requires_grad # 当前节点是否需要
计算梯度
        pass
```

在我们了解了节点的重要信息之后，我们需要用节点来构建表达式。

下面我以乘法为例 $z = x \times y$

```
x = Carrot(data=2.0, requires_grad=True, name="x")
y = Carrot(data=4.0, requires_grad=True, name="y")
```

可是`Carrot`节点之间是如何实现乘法`z = x * y`的呢？

先给出结论：

1. 实现`Carrot`实例内部数据之间的乘法。
2. 构建`z`节点的依赖信息`child_nodes`
3. 根据运算得到的内容构建新的`Carrrot`实例`z`

下面是伪代码：

```
result_data = x.data * y.data
child_nodes = [(x, grad_wrt_x), (y, grad_wrt_y)]
requires_grad = x.requires_grad or y.requires_grad

return Carrot(result_data, child_nodes, requires_grad,
name="add")
```

> 注意：使用运算符重载实现

```
def __mul__(self, other: "Carrot") -> "Carrot":
    """
    left mul: self * other
    """
    data = self.data * other.data
    requires_grad = self.requires_grad or
other.requires_grad
    child_nodes = []
    if self.requires_grad:

        def grad_wrt_self(grad):
            return grad * other.data

        child_nodes.append((self, grad_wrt_self))
    if other.requires_grad:

        def grad_wrt_other(grad):
            return grad * self.data
```

```
        child_nodes.append((other, grad_wrt_other))

    result_node = Carrot(
        data=data, child_nodes=child_nodes, name="mul",
requires_grad=requires_grad
    )
    return result_node
```

我们测试一下

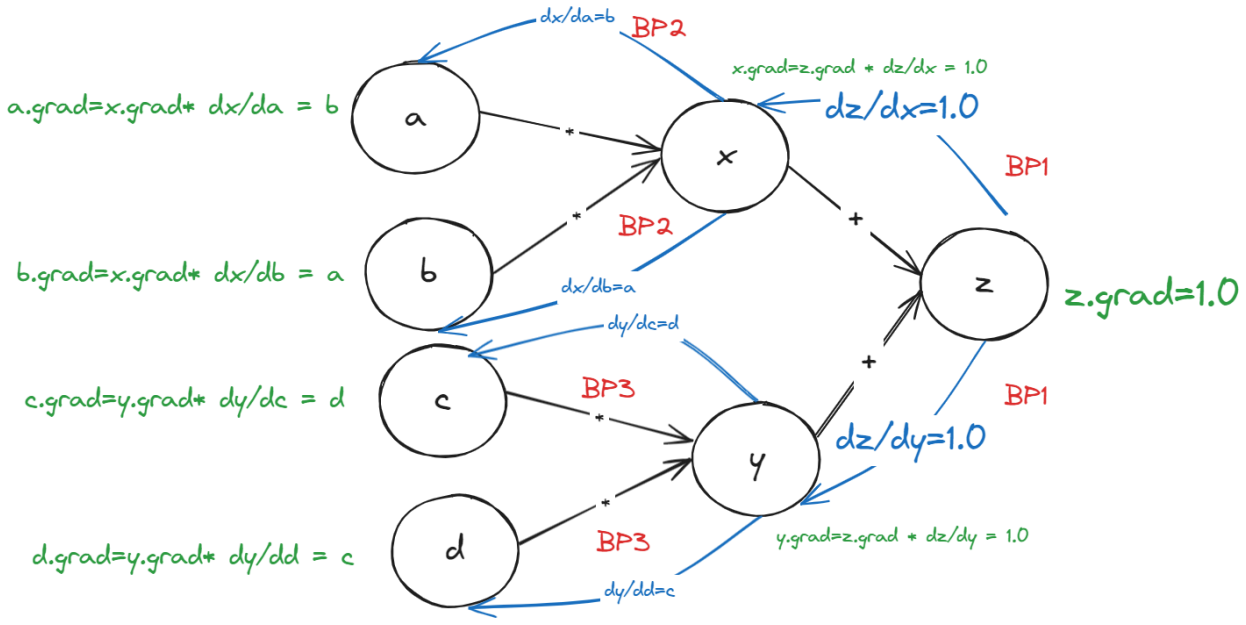
```
x = Carrot(data=2.0, requires_grad=True, name="x")
y = Carrot(data=4.0, requires_grad=True, name="y")
z = x +  y
print(z.data)
print(z.requires_grad)
print(z.grad)
print(z.name)
print(z.child_nodes[0][0])
print(z.child_nodes[0][1])
print(z.child_nodes[1][0])
print(z.child_nodes[1][1])
---
8.0
True
0
mul
<__main__.Carrot object at 0x000001B5F0A44AA0>
<function Carrot.__mul__.<locals>.grad_wrt_self at
0x000001B5F0DB6FC0>
<__main__.Carrot object at 0x000001B5F0E0EE10>
<function Carrot.__mul__.<locals>.grad_wrt_other at
0x000001B5F0DB7380>
```

既然实现了乘法`z = x * y`，那么我们对`z`应用反向传播算法进行梯度计算。

笔者实现的反向传播主要做了以下几件事：

1. 计算当前节点`z`的梯度，即设置为`1`。
2. 遍历当前节点`z`的`child_nodes:list`，通过当前节点的`grad`和`grad_wrt_operand()`计算子姐弟那的梯度。接着调用子节点`bp()`将其`grad`递归传递到叶子节点。
3. 做的是深度优先遍历。

可能比较难理解，给出图示加深理解



下面是具体的代码实现：

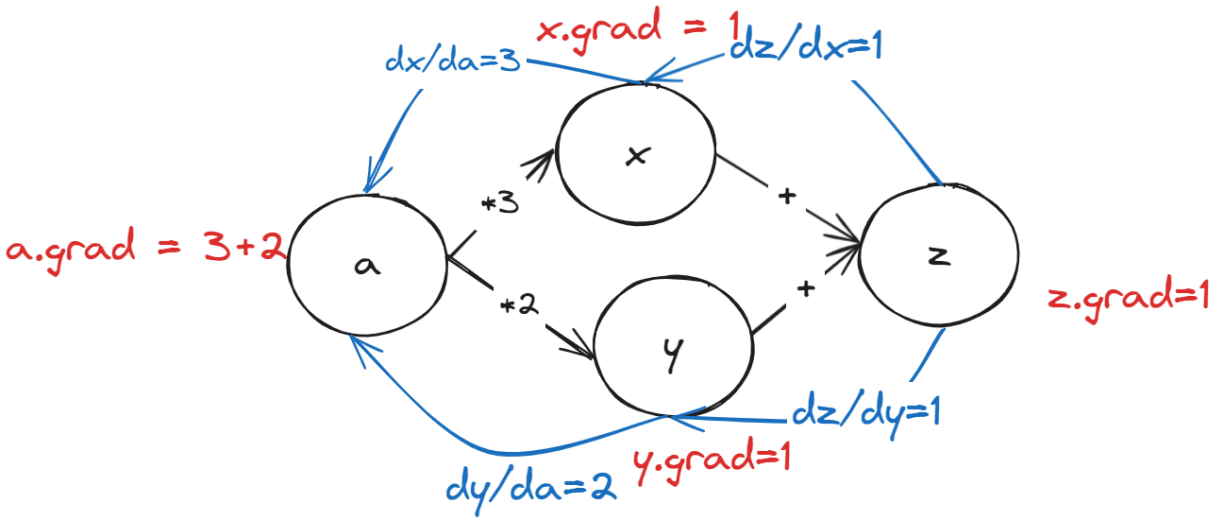
```
def backward(self, grad=None):
    """
    backward pass
    """
    if grad is None:
        self.grad = 1.0
        grad = 1.0
```

```
    else:
        self.grad += grad
        pass
    # recursion for bp
    for child_node, grad_wrt_func in self.child_nodes:
        child_node: Carrot
        child_node_grad = grad_wrt_func(
            grad
        )  # calculate partial grad, in the following bp,
need to add partial grad
        child_node.backward(child_node_grad)
        pass
    pass
```

我详细解释一下下面一段代码：

```
if grad is None:
    self.grad = 1.0
    grad = 1.0
else:
    self.grad += grad
    pass
```

既然当前节点能够运行`BP`算法，并且`if grad is None:`说明是从当前当前节点开始反向传播的，那么要设置当前节点的梯度为`1.0`，即`self.grad=1.0`，还要将**要传递的梯度**设置为`1.0`，即`grad=1.0`。如果要传递的梯度不为`None`,则要进行`self.grad+=grad`，为什么？



从数学的角度来理解，**即某一个变量可以分不同的路径对结果变量造成影响/改变**，而反向传播每一次是按照一条路径传播梯度的，那么要计算某一个节点的梯度/影响，则要将该变量在每一条路径梯度/影响加和来计算总的梯度/梯度。

我们实现了`Carrot`类以及对该类的运算和反向传播，下面进行测试。

测试1：

$$z = x \times y$$

$$\text{Get:} \frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial y}$$

```
x = Carrot(data=2.0, requires_grad=True, name="x")
y = Carrot(data=4.0, requires_grad=True, name="y")
z = x *  y
z.backward()
print(f"z.grad={z.grad}")
print(f"y.grad={y.grad}")
print(f"x.grad={x.grad}")

---
z.grad=1.0
y.grad=2.0
x.grad=4.0
```

测试2:

$$
\begin{aligned}
a &= 2 \\
x &= 2 \times a \\
y &= 3 \times a \\
z &= x + y \\
\text{Get}: &\frac{\partial z}{\partial a}
\end{aligned}
$$

```
a = Carrot(data=1.0, requires_grad=True, name="a")
coefficient1 = Carrot(data=2.0, requires_grad=False)
coefficient2 = Carrot(data=3.0, requires_grad=False)
z = a*coefficient1 + a * coefficient2
z.backward()
print(f"z.grad={z.grad}")
print(f"a.grad={a.grad}")
z.zero_grad()
---
z.grad=1.0
a.grad=5.0
```

至此，常量版本的`BP`算法已经实现，下面我们会在常量版本的基础上构建张量版本的`BP`算法。

张量版本

要点（非常重要）

要点1：使用`Numpy`来表示`Carrot`的`data`属性

使用`python`中`loop`来实现的同样维度的矩阵乘法，速度在`minute`级别（笔者跑了10分钟没跑完）。

```
c = np.zeros((size,size))

for i in range(size):
  for j in range(size):
    for k in range(size):
      c[i,j] += a[i,k] * b[k,j]
    pass
  pass

---
10min+
```

使用`numpy`来实现矩阵乘法，速度在`ms`级别。

```
import numpy as np

size = 600
a = np.random.rand(size, size)
b = np.random.rand(size, size)
x = numpy.dot(a,b)

---
8.63 ms ± 2.2 ms per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1
loop each)
```

numpy已经这么快了，但是将`PyTorch`中实现的`Tensor`放到`GPU`上，速度更快，在微秒（μs）级别。

```
import torch

aa = torch.cuda.FloatTensor(a)
bb = torch.cuda.FloatTensor(b)

cc = torch.matmul(aa, bb)

---
70.7 µs ± 76 µs per loop (mean ± std. dev. of 7 runs, 1
loop each)
```

要点2： 某个张量的梯度的`shape`是和其张量的`shape`是一样的。

举个例子

```
a = [1, 2, 3]
grad_a = [1, 1, 1]
# a.shape = grad_a.shape = (3,)

b = [[1], [2], [3]]
b = [[1], [1], [1]]
# b.shape = grad_b.shape = (3, 1)
```

要点3：矩阵微分

在本框架的实现中，我们使用了两个矩阵微分。

> `grad`是父节点传播过来的梯度。

$$S = AB$$

$$\frac{\partial S}{\partial A} = \text{grad} B^T$$

$$\frac{\partial S}{\partial B} = A^T \text{grad}$$

请查阅书籍《The Martrix Cookbook》获取更多矩阵微分相关的信息：https://www.math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf

补充：实现`Parameter class`

在`Carrot class`的实现中，`self.requires_grad=False`，即说明`Carrot class`的实例默认是不可以微分的。

但是在神经网络中参数实例是可微分的，并且支持`BP`算法。

所以让`Carrot class`作为`Parameter class`的基类。

主要做的事情就是，在`__init__()`初始化阶段更改`self.requires_grad = True`，其它全盘继承`Tensor class`。

当然可以选择不用实现`Parameter class`，定义的模型的时候用`Carrot class`，只不过初始化的时候设置`self.requires_grad = True`。

笔者这里补充说明`Carrot class`是为了后续文档的撰写需求。

神经网络架构

概括

在笔者使用`PyTorch`搭建神经网络的时候，会将`PyTorch`提供的`Module`作为基类。

使用以下代码实现一个简单的`Model class`

```
class Model(nn.Module):
    def __init__(self):
        super().__init__()
        pass

    def forward(self, input):
        pass
```

实现`Module class`

`Module class`的介绍

定义和作用

1. 神经网络的基类：`Module`是`PyTorch`中所有神经网络模块（如层、模型等）的基类。用户可以通过继承`Module`类来定义自定义的网络组件。比如可以通过继承来实现`Linear layer`和`Conv layer`
2. 封装参数和结构：`Module`封装了网络的参数（通常是`Parameter`）和前向传播的计算逻辑。

3. 模块化与复用：通过模块化设计，可以轻松构建复杂的神经网络，并复用已有的网络组件。

主要特性

1. 参数管理：`Module`可以自动管理其内部的参数（`Tensor`），并提供便捷的方法来访问和更新这些参数（如`parameter()`、`state_dict()`等）。
2. 层次化结构：支持嵌套，允许一个`Module`包含其他`Module`，从而构建层次化的网络结构。
3. 前向传播定义：需要用户在子类中定义`forward`方法，指定数据如何通过模块进行前向传播。

代码实现

代码概览

```
class Module(object):

    def __call__(self, *args, **kwds):
        """
        let module object call as a function.
        """
        return self.forward(*args, **kwds)
    def forward(self, *args, **kwds):
        """
        forward propagation for get predicted result.
        """
        pass
    def parameter(self) -> list:
        """
        get model trained parameters to manage and
optimize.
        """
```

```
        pass


model = Model()
pred = model(input)
```

`__call__() magic method`让`Module`实例可以向函数一样调用，在神经网络中，主要调用的是前向传播的逻辑`forward() method`。

因为不同的网络有不同的前向传播方式，所以会在子类中实现`forward() method`。

虽然不同的网络有不同的前向传播方式，但是获取参数的方式是统一的，所以会在`Module base class`中实现`parameter() method`，其作用主要是以列表的形式获取`model`中可训练/微分的参数。

`parameter() method`的实现

```
def parameter(self) -> list:
    """
    get model trained parameters to manage and optimize.
    """
    attributes = self.__dict__
    parameters = []

    for _, attr_value in attributes.items():
        attr_value: Parameter | Module
        if type(attr_value) == Parameter:
            parameters.append(attr_value)
            pass
        if hasattr(attr_value, "parameter"):
            """
            check if current attr_value has a parameter()
method.
            that means current attr_value is a module.
```

```
                """
                parameters.extend(attr_value.parameter())
                pass
            pass
        return parameters
```

笔者简单叙述一下:

1. 获取当前模型的`property dict`
2. 遍历`property dict`，如果`property dict`中的`value`是`Parameter class`的实例，则将`value`添加到`parameters: list`中。如果`property dict`中的`value`是`parameter() method`，则说明`value`是`Module`的一个实例，则调用`parameter() method`获取可训练/微分参数。

【2】不能够理解的话，看以下一段代码:

```
class Model(Module):
    def __init__(self):
        super.__init__()
        self.layer = Linear(784, 10)
        pass
```

在笔者定义的`Model class`中，有属性是`Linear class`的实例，而`Linear class`是继承自`Module class`，所以在`Linear class`的实例`layer`中也有`parameter() method`。

实现`Linear class`

笔者简单叙述一下:

1. `Linear class`继承自`Module class`。
2. 在初始化阶段，初始化两个`Parameter class`实例属性。可以对照 $y = w\times x + b$来理解。

3. 实现前向传播逻辑`forward() method`。

```
class Linear(Module):
    def __init__(self, input_dimen, output_dimen) -> None:
        super().__init__()
        self.weight = Parameter(np.random.normal(0, 1,
[input_dimen, output_dimen]), requires_grad=True)
        self.bias = Parameter(np.zeros([output_dimen]),
requires_grad=True)
        pass

    def forward(self, input:Carrot) -> Carrot:
        output = input @ self.weight + self.bias
        return output
```

损失函数

在本框架下，笔者实现了均方误差损失函数`MSELosss()`
给出数学表达式：

$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{N}\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|_2^2$$

```
def mse_loss(predicted: Carrot, target: Carrot) -> Carrot:
    """
    mse: mean square error
    """
    # type 1: return expression, but more nodes and low
speed
    # return ((predicted - target) ** 2).mean()

    # type 2: consider grad
    number = len(predicted)
    loss = np.mean((predicted.data - target.data) ** 2)
```

```
    requires_grad = predicted.requires_grad or
target.requires_grad
    child_nodes = []
    if predicted.requires_grad:

        def grad_wrt_predicted(grad):
            return 2 * (predicted.data - target.data) *
grad / number

        child_nodes.append((predicted, grad_wrt_predicted))
        pass

    if target.requires_grad:

        def grad_wrt_target(grad):
            return 2 * (target.data - predicted.data) *
grad / number

        child_nodes.append((target, grad_wrt_target))
        pass

    result_node = Carrot(
        data=loss,
        requires_grad=requires_grad,
        child_nodes=child_nodes,
        name="mse",
    )
    return result_node
```

> 注意：可以使用对`Carrot class`的基本运算来构建`MSELoss func`，但会产生更多的`Carrot`节点，`BP`的效率也会更低。

优化器

在本框架下，笔者实现了随机梯度下降（SGD）算法。
给出数学表达式：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla \ell(\theta_t; x_{i_t}, y_{i_t})$$

其中θ在本框架下是`Parameter class`的实例。

```
class SGD(Optim):
    def __init__(self, parameters: list, learning_rate=0.1,
weight_decay=0.0) -> None:
        super().__init__()
        self.learning_rate = learning_rate
        self.weight_decay = weight_decay
        self.parameters = parameters
        pass

    def step(self):
        for parameter in self.parameters:
            parameter: Parameter
            decent_value = parameter.grad.data +
self.weight_decay * parameter.data
            parameter.data -= self.learning_rate *
decent_value
            pass
        pass
```

PyCarrot测试

1. 反向传播测试：`test_bp.ipynb`
2. 线性回归测试：`test_linear_regression.ipynb`
3. 模型保存和加载测试：`test_save&load.ipynb`