## 深度学习之自动微分

荣耀学院

2022年07月

# 第一版序言

自动微分是深度学习的基石之一。自动微分实现了深度学习的梯度计算的自动化,节省了大量推导时间。

本书致力于让所有人都能完全掌握自动微分。

本书最佳使用方式:拿出纸和笔,亲自推导所有公式,运行所有的代码。 为了便于理解和学习,本书所有的推导给出了所有步骤,不做任何省略。 iv 第一版序言

# 目录

第一版月	<b>芳吉</b>	iii
第一章	起源	1
第二章	前向推导微分的例子	3
第三章	反向推导微分的例子	9
第四章	计算图	13
第五章	自动微分的 Python 实现	17

vi 目录

### 第一章 起源

- 一个神经网络, 无论有多大, 无论有多复杂, 只是表达一个函数。
- 一个简单的三层前馈神网络如此。一个十几亿参数的深度学习模型也是如 此。

这个函数的参数是权重 (Weight) 和偏差 (Bias)。神经网络越复杂,权重和偏差越多。用w表示权重,b表示偏差,这个函数可以表示为:

$$f_{w_0,w_1,...,x_i,...,b_0,b_1,...,b_i,...}(\cdot)$$

用 w 表示所有的  $w_i$ , 用 b 表示所有的  $b_i$ , 上式又可以写成:

$$f_{\boldsymbol{w},\boldsymbol{b}}(\cdot)$$

这个函数,有一个或者多个输入,一个或者多个输出。用x表示输入,y表示输出,这个函数可以表示为:

$$y_0, y_1, ..., y_k, ... = f_{\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}}(x_0, x_1, ..., x_l, ...)$$

用 y 表示所有的  $y_k$ , 用 x 表示所有的  $x_l$ , 上式又可以写成:

$$\boldsymbol{y} = f_{\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}}(\boldsymbol{x})$$

神经网络的训练,本质上就是"调整"这个函数的 w 和 b,使得输入是 x 的时候,输出非常接近 y。

"调整"的方式,就是微分求极值,也就需要推导目标函数对  $\boldsymbol{w}$  和  $\boldsymbol{b}$  的一阶偏导。

如果这个函数比较简单,可以手工推导微分。如果函数很复杂,手工推导也就太麻烦了,需要一种自动的方式。深度学习模型很复杂,需要自动微分。

## 第二章 前向推导微分的例子

先用最简单的例子研究微分问题。 第一个例子:

$$y = x_0 + x_1$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_0} = \frac{\partial (x_0 + x_1)}{\partial x_0}$$

$$= \frac{\partial x_0}{\partial x_0} + \frac{\partial x_1}{\partial x_0}$$

$$= 1 + 0$$

$$= 1$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial (x_0 + x_1)}{\partial x_1}$$
$$= \frac{\partial x_0}{\partial x_1} + \frac{\partial x_1}{\partial x_1}$$
$$= 0 + 1$$
$$= 1$$

第二个例子:

$$y = 2x_0 + 3x_1$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_0} = \frac{\partial (2x_0 + 3x_1)}{\partial x_0}$$

$$= \frac{\partial (2x_0)}{\partial x_0} + \frac{\partial (3x_1)}{\partial x_0}$$

$$= 2 + 0$$

$$= 2$$

$$\frac{\partial y}{\partial x_1} = \frac{\partial (2x_0 + 3x_1)}{\partial x_1}$$

$$= \frac{\partial (2x_0)}{\partial x_1} + \frac{\partial (3x_1)}{\partial x_1}$$

$$= 0 + 3$$

$$= 3$$

在这个例子, 计算 y 需要做两次乘法和一次加法。一个函数的复杂度是不定的, 如果要做自动微分, 肯定不能一次性地对复杂度不定的函数做微分。要拆分, 拆成每次做一个运算, 然后再组合。因此, 可以把这个函数调整成:

$$v_0 = 2x_0$$

$$v_1 = 3x_1$$

$$y = v_0 + v_1$$

假如要计算 y 对  $x_0$  的一阶偏导,根据上面三个公式的次序,可以依次按照如下步骤计算:

$$\dot{v_0}|_{x_0} = \frac{\partial v_0}{\partial x_0} = 2$$

$$\dot{v_1}|_{x_0} = \frac{\partial v_1}{\partial x_0} = 0$$

$$\dot{y}|_{x_0} = \frac{\partial(v_0 + v_1)}{\partial x_0}$$

$$= \frac{\partial v_0}{\partial x_0} + \frac{\partial v_1}{\partial x_0}$$

$$= \dot{v_0}|_{x_0} + \dot{v_1}|_{x_0}$$

$$= 2 + 0$$

$$= 2$$

假如要计算 y 对  $x_1$  的一阶偏导,可以依次按照如下步骤计算:

$$\dot{v_0}|_{x_1} = \frac{\partial v_0}{\partial x_1} = 0$$

$$\dot{v_1}|_{x_1} = \frac{\partial v_1}{\partial x_1} = 3$$

$$\dot{y}|_{x_1} = \frac{\partial(v_0 + v_1)}{\partial x_1}$$

$$= \frac{\partial v_0}{\partial x_1} + \frac{\partial v_1}{\partial x_1}$$

$$= \dot{v_0}|_{x_1} + \dot{v_1}|_{x_1}$$

$$= 0 + 3$$

$$= 3$$

第三个例子:

调整一下 y 的值:

$$v_0 = 2x_0$$

$$v_1 = 3x_1$$

$$y = \frac{v_0}{v_1}$$

假如要计算 y 对  $x_0$  的一阶偏导,根据上面三个公式的次序,可以依次按照如下步骤计算:

$$\begin{aligned} \dot{v_0}|_{x_0} &= \frac{\partial v_0}{\partial x_0} = 2 \\ \dot{v_1}|_{x_0} &= \frac{\partial v_1}{\partial x_0} = 0 \\ \dot{y}|_{x_0} &= \frac{\partial (\frac{v_0}{v_1})}{\partial x_0} \\ &= \frac{\partial v_0}{\partial x_0} \frac{1}{v_1} + v_0(-1) \frac{1}{v_1^2} \frac{\partial v_1}{\partial x_0} \\ &= \dot{v_0}|_{x_0} \frac{1}{v_1} - \frac{v_0}{v_1^2} \frac{\partial v_1}{\partial x_0} \\ &= \dot{v_0}|_{x_0} \frac{1}{v_1} - \frac{v_0}{v_1^2} \dot{v_1}|_{x_0} \\ &= \frac{2}{3x_1} - \frac{v_0}{v_1^2} \cdot 0 \\ &= 2 \end{aligned}$$

假如要计算 y 对  $x_1$  的一阶偏导,可以依次按照如下步骤计算:

 $\dot{v_0}|_{x_1} = \frac{\partial v_0}{\partial x_1} = 0$ 

$$\begin{aligned} \dot{v_1}|_{x_1} &= \frac{\partial v_1}{\partial x_1} = 3 \\ \dot{y}|_{x_1} &= \frac{\partial (\frac{v_0}{v_1})}{\partial x_1} \\ &= \frac{\partial v_0}{\partial x_1} \frac{1}{v_1} + v_0 (-1) \frac{1}{v_1^2} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= \dot{v_0}|_{x_1} \frac{1}{v_1} - \frac{v_0}{v_1^2} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= \dot{v_0}|_{x_1} \frac{1}{v_1} - \frac{v_0}{v_1^2} \dot{v_1}|_{x_0} \\ &= 0 - \frac{v_0}{v_1^2} \cdot 3 \\ &= -\frac{2x_0}{3x_1^2} \cdot 3 \\ &= -\frac{2x_0}{3x_1^2} \end{aligned}$$

用前向方式推导微分,有啥问题? 重复!  $x_0$  推一遍, $x_1$  推一遍。如果有几亿个  $x_i$ ,要推导几亿次。

能省下来吗?

可以。

怎么做?

反向推导微分。

### 第三章 反向推导微分的例子

第一个例子:

$$v_0 = 2x_0$$

$$v_1 = 3x_1$$

$$y = v_0 + v_1$$

反向推导,对上面三个公式,按照从下向上推导。先推导 y 对  $v_0$  和  $v_1$  的一阶偏导。再推导  $v_1$  和  $v_0$  分别对  $x_1$  和  $x_0$  的一阶偏导。按照这个次序:

$$\dot{y}|_{v_0} = \frac{\partial y}{\partial v_0}$$

$$= \frac{\partial (v_0 + v_1)}{\partial v_0}$$

$$= \frac{\partial v_0}{\partial v_0} + \frac{\partial v_1}{\partial v_0}$$

$$= 1 + 0$$

$$= 1$$

$$\begin{aligned} \dot{y}|_{v_1} &= \frac{\partial y}{\partial v_1} \\ &= \frac{\partial (v_0 + v_1)}{\partial v_1} \\ &= \frac{\partial v_0}{\partial v_1} + \frac{\partial v_1}{\partial v_1} \\ &= 0 + 1 \\ &= 1 \end{aligned}$$

$$\dot{y}|_{x_0} = \frac{\partial y}{\partial v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_0} + \frac{\partial y}{\partial v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_0}$$

$$= \dot{y}|_{v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_0} + \dot{y}|_{v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_0}$$

$$= 1 \cdot \frac{\partial v_0}{\partial x_0} + 1 \cdot \frac{\partial v_1}{\partial x_0}$$

$$= \frac{\partial v_0}{\partial x_0} + \frac{\partial v_1}{\partial x_0}$$

$$= 2 + 0$$

$$= 2$$

$$\begin{aligned} \dot{y}|_{x_1} &= \frac{\partial y}{\partial v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= \dot{y}|_{v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_1} + \dot{y}|_{v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= 1 \cdot \frac{\partial v_0}{\partial x_1} + 1 \cdot \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= \frac{\partial v_0}{\partial x_1} + \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= 0 + 3 \\ &= 3 \end{aligned}$$

看,总推导次数变少了。上一章推导  $\dot{y}|_{x_0}$  和  $\dot{y}|_{x_1}$  一共需要做 6 次推导,现在是 4 次。

第二个例子:

$$v_0 = 2x_0$$

$$v_1 = 3x_1$$

$$y = \frac{v_0}{v_1}$$

反向推导,按照这个次序:

$$\dot{y}|_{v_0} = \frac{\partial y}{\partial v_0} \\
= \frac{\partial \left(\frac{v_0}{v_1}\right)}{\partial v_0} \\
= \frac{1}{v_1}$$

$$\dot{y}|_{v_1} = \frac{\partial y}{\partial v_1} \\
= \frac{\partial \left(\frac{v_0}{v_1}\right)}{\partial v_1} \\
= v_0(-1)\frac{1}{v_1^2} \\
= -\frac{v_0}{v_1^2}$$

$$\dot{y}|_{x_0} = \frac{\partial y}{\partial v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_0} + \frac{\partial y}{\partial v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_0}$$

$$= \dot{y}|_{v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_0} + \dot{y}|_{v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_0}$$

$$= \frac{1}{v_1} \cdot 2 - \frac{v_0}{v_1^2} \cdot 0$$

$$= \frac{2}{3x_1}$$

$$\begin{split} \dot{y}|_{x_1} &= \frac{\partial y}{\partial v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_1} + \frac{\partial y}{\partial v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= \dot{y}|_{v_0} \frac{\partial v_0}{\partial x_1} + \dot{y}|_{v_1} \frac{\partial v_1}{\partial x_1} \\ &= \frac{1}{v_1} \cdot 0 - \frac{v_0}{v_1^2} \cdot 3 \\ &= -\frac{2x_0}{3x_1^2} \end{split}$$

# 第四章 计算图

计算图,没有任何神奇,只是把函数的计算过程用图形表示出来,更直观了。

比如:

$$v_0 = x_0$$

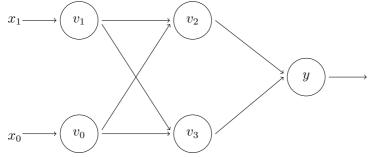
$$v_1 = x_1$$

$$v_2 = v_0 v_1$$

$$v_3 = \frac{v_1}{v_0}$$

$$y = v_2 + v_3$$

用图表示函数值的计算过程, 就是:



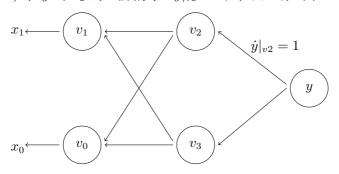
设  $x_0 = 3$ ,  $x_1 = 5$ , 依次求值结果:

$$v_0 = x_0 = 3$$
  
 $v_1 = x_1 = 5$   
 $v_2 = v_0 v_1 = 3 \cdot 5 = 15$   
 $v_3 = \frac{v_1}{v_0} = \frac{5}{3}$ 

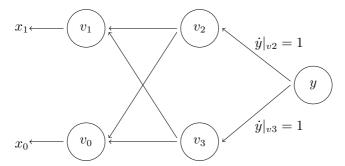
$$y = v_2 + v_3 = 16\frac{2}{3}$$

此时, $x_0 = 3$ , $x_1 = 5$ ,求 y 对  $x_0$  和  $x_1$  的一阶偏导的值。 用反向推导在图上求解:

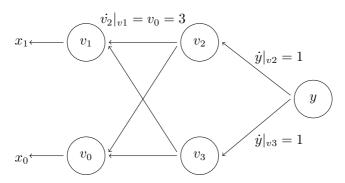
1) 求 y 对  $v_2$  的一阶偏导:  $\dot{y}|_{v_2} = 1$ , 在图上标出来:



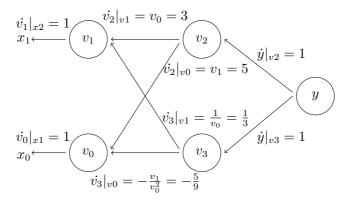
2) 求 y 对  $v_3$  的一阶偏导:  $\dot{y}|_{v_2}=1$ , 在图上标出来:



3) 求  $v_2$  对 1 的一阶偏导:  $\dot{v_2}|_{v_1} = v_0 = 3$ , 在图上标出来:



4) 依次求出后续所有偏导,都在图上标出来,结果如下:



在图上,假如给  $v_2$  节点增加一个变量 grad 记录它的梯度,那么可以表示为  $v_2.grad=\dot{y}|_{v_2}=1$ 。

同理,对  $v_3$  也进行这个操作,  $v_3.grad = \dot{y}|_{v_3} = 1$  注意,到关键点了,  $v_1.grad$  是什么?  $v_1.grad$  的本质是:

$$v_1.grad = \dot{y}|_{v_1} = \frac{\partial y}{\partial v_1}$$

因为

$$\begin{split} \dot{y}|_{v_1} &= \frac{\partial y}{\partial v_1} \\ &= \frac{\partial y}{\partial v_2} \frac{\partial v_2}{\partial v_1} + \frac{\partial y}{\partial v_3} \frac{\partial v_3}{\partial v_1} \\ &= \dot{y}|_{v_2} \cdot \dot{v_2}|_{v_1} + \dot{y}|_{v_3} \cdot \dot{v_3}|_{v_1} \end{split}$$

所以,  $v_1$  的梯度在图上, 就表现为从 y 到  $v_1$  的两条路径的累加。一条路是 y,  $v_2$ ,  $v_1$ , 另一条路是 y,  $v_3$ ,  $v_1$ 。因此它的值计算起来是非常清晰的:

$$\begin{array}{rcl} \dot{y}|_{v_1} & = & \dot{y}|_{v_2} \cdot \dot{v_2}|_{v_1} + \dot{y}|_{v_3} \cdot \dot{v_3}|_{v_1} \\ \\ & = & v_2.grad \cdot \dot{v_2}|_{v_1} + v_3.grad \cdot \dot{v_3}|_{v_1} \\ \\ & = & 1 \cdot 3 + 1 \cdot \frac{1}{3} \\ \\ & = & 3\frac{1}{3} \end{array}$$

因此, $v_1.grad = \dot{y}|_{v_1} = 3\frac{1}{3}$ 。

有了上面的经验,  $v_0.grad$  的计算可以直接从图上算出来, 不再推导了:

$$\begin{array}{lcl} \dot{y}|_{v_0} & = & \dot{y}|_{v_2} \cdot \dot{v_2}|_{v_0} + \dot{y}|_{v_3} \cdot \dot{v_3}|_{v_0} \\ \\ & = & v_2.grad \cdot \dot{v_2}|_{v_0} + v_3.grad \cdot \dot{v_3}|_{v_0} \\ \\ & = & 1 \cdot 5 + 1 \cdot (-\frac{5}{9}) \\ \\ & = & 4\frac{4}{9} \end{array}$$

因此, $v_0.grad = \dot{y}|_{v_0} = 4\frac{4}{9}$ 。 在图上按照同样的规则,可以计算出  $\dot{y}|_{x_1}$ :

$$\begin{array}{rcl} \dot{y}|_{x_1} & = & \dot{y}|_{v_1} \cdot \dot{v_1}|_{x_1} \\ & = & v_1.grad \cdot 1 \\ & = & 3\frac{1}{3} \cdot 1 \\ & = & 3\frac{1}{3} \end{array}$$

也在图计算出  $\dot{y}|_{x_0}$ :

至此,全部计算就完成了,都在图上进行。

注意到,图上的四个节点  $v_0$ ,  $v_1$ ,  $v_2$ ,  $v_3$ , 都有 grad 变量,但 y 节点没有,为了保持"形式"上的一致性,也给 y 节点添加 grad 变量,令 y.grad=1,1乘上任何数都不改变结果,因此设 y.grad=1 是最合适的。

下一步,用代码实现计算图。

# 第五章 自动微分的 Python 实现

这一章,用最简单最原始的方式实现自动微分,不做任何优化,以便于理解。

继续使用上一章的例子:

$$v_0 = x_0$$

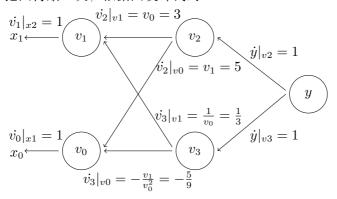
$$v_1 = x_1$$

$$v_2 = v_0 v_1$$

$$v_3 = \frac{v_1}{v_0}$$

$$y = v_2 + v_3$$

把图再贴一次,根据图设计代码:



从节点 y 开始分析。

先用一个类表示节点:

class Node(object):
 pass

每个节点是 Node 类的实例。每个节点都有自己的梯度,也就是 grad,初始值为 0。y 节点的 grad 在运行会设置为 1。

```
class Node(object):
    def __init__(self):
        self.grad = 0
```

每个节点有且只有一个运算 Operation, 执行节点的计算功能, 实例变量 是 op, 初始值设为 None。

```
class Node(object):

   def __init__(self):
      self.grad = 0
      self.op = None
```

有运算,就有数值。一个运算可以对 0 个、1 个、多个数值进行运算,实例变量是 inputs,因为数量不定,因此数据类性是列表,初始值设为 [],运算结果存放在变量 value,初始值为 0。

```
class Node(object):

def __init__(self):
    self.grad = 0
    self.op = None
    self.inputs = []
    self.value = 0
```

每个节点需要计算节点值,增加 evaluate 函数:

```
class Node(object):

def __init__(self):
    self.grad = 0
    self.op = None
    self.inputs = []
    self.value = 0

def evaluate(self):
    self.op.compute(self.inputs)
```

每个节点需要计算节点的梯度,增加 gradient 函数,具体的计算,由节点的 op 运算变量执行,又因为后续节点的梯度跟当前节点的梯度是相关的,因此要把当前节点的 grad 值传入。

```
class Node(object):

def __init__(self):
    self.grad = 0
    self.op = None
    self.inputs = []
    self.value = 0

def evaluate(self):
    self.op.compute(self.inputs)

def gradient(self):
    self.op.gradient(self.inputs, self.grad)
```

### 定义运算基类 Operation:

```
class Operation(object):
    def compute(self, inputs):
        pass

def gradient(self, inputs, current_grad):
        pass
```

实现具体的运算。

第一个是 AddOp。这个运算符,值计算很简单。梯度计算,把当前节点的 grad 累加到后续节点的 grad 上就行了。

```
class AddOp(Operation):

   def compute(self, inputs):
       return inputs[0].value + inputs[1].value

   def gradient(self, inputs, current_grad):
       inputs[0].grad += current_grad
       inputs[1].grad += current_grad
```

第二个是 MulOp。梯度计算,把当前节点的 grad 乘以另一个输入值,然后累加到后续节点的 grad 上就行了。

```
class MulOp(Operation):

   def compute(self, inputs):
       return inputs[0].value * inputs[1].value

   def gradient(self, inputs, current_grad):
       inputs[0].grad += current_grad*inputs[1].value
       inputs[1].grad += current_grad*inputs[0].value
```

#### 第三个是 DivOp。

```
class DivOp(Operation):

   def compute(self, inputs):
       return inputs[0].value / inputs[1].value

   def gradient(self, inputs, current_grad):
       inputs[0].grad += current_grad/inputs[1].value
       inputs[1].grad += -current_grad*inputs[0].value/pow(inputs[1].value,2)
```

#### 需要把实数封装成 Node。

```
class RealNode(Node):

def __init__(self, v):
    self.grad = 0
    self.op = None
    self.inputs = None
    self.value = v

def evaluate(self):
    return

def gradient(self):
    return
```

执行计算,要从图的左侧向右侧执行,计算微分,要从右侧向左侧执行, 因此要对节点进行排序:

```
def get_nodes(root, node_list):
    if root.inputs == None:
        node_list.append(root)
        return
    for i in root.inputs:
        get_nodes(i, node_list)
        if not(i in node_list):
            node_list.append(i)
        node_list.append(root)
```

### 正向计算输出值,反向计算微分:

```
def run(root):
    node_list = []
    #把所有节点排序,从叶节点排到root,不重复
    get_nodes(root, node_list)
    #计算y值
    for i in node_list:
        i.evaluate()
    #反向微分
    node_list.reverse()
    for i in node_list:
        i.gradient()
```

这些代码是初步设计结果,经过调整后,得到正式代码:

```
class Node(object):
    def __init__(self, inputs, op):
        self.grad = 0
        self.op = op
        self.inputs = inputs
        self.value = 0
    def evaluate(self):
        self.op.compute(self, self.inputs)
    def gradient(self):
        self.op.gradient(self.inputs, self.grad)
class Operation(object):
    def __call__(self, nodes):
        return Node(nodes, self)
    def compute(self, current_node, inputs):
        pass
    def gradient(self, inputs, current_grad):
class AddOp(Operation):
    def compute(self, current_node, inputs):
        current_node.value = inputs[0].value + inputs[1].value
    def gradient(self, inputs, current_grad):
        inputs[0].grad += current_grad
        inputs[1].grad += current_grad
class MulOp(Operation):
    def compute(self, current_node, inputs):
        current_node.value = inputs[0].value * inputs[1].value
    def gradient(self, inputs, current_grad):
        inputs[0].grad += current_grad*inputs[1].value
        inputs[1].grad += current_grad*inputs[0].value
```

```
class DivOp(Operation):
   def compute(self, current_node, inputs):
        current_node.value = inputs[0].value / inputs[1].value
   def gradient(self, inputs, current_grad):
        inputs[0].grad += current_grad/inputs[1].value
        inputs[1].grad += -current_grad*inputs[0].value/pow(inputs[1].value,2)
class RealNode(Node):
   def __init__(self, v):
       self.grad = 0
       self.op = None
        self.inputs = None
        self.value = v
   def evaluate(self):
       return
   def gradient(self):
       return
def get_nodes(root, node_list):
   if root.inputs == None:
       node_list.append(root)
       return
   for i in root.inputs:
        get_nodes(i, node_list)
       if not(i in node_list):
           node_list.append(i)
   node_list.append(root)
def run(root):
   node_list = []
   #把所有节点排序,从叶节点排到root,不重复
   get_nodes(root, node_list)
   #计算y值
   for i in node_list:
        i.evaluate()
   #反向微分
   node_list.reverse()
   for i in node_list:
        i.gradient()
```

```
x0 = RealNode(3)
x1 = RealNode(5)
v0 = x0
v1 = x1
v2 = MulOp()([v0, v1])
v3 = DivOp()([v1, v0])
y = AddOp()([v2, v3])
y.grad = 1
run(y)

print('y.value = ', y.value)
print('x0.grad = ', x0.grad)
print('x1.grad = ', x1.grad)
```

#### 代码运行输出结果:

```
y.value = 16.6666666666668
x0.grad = 4.4444444444445
x1.grad = 3.33333333333333333
```

这些值,跟此前计算出来的, $y=16\frac{2}{3},\ \dot{y}|_{x_0}=4\frac{4}{9},\ \dot{y}|_{x_1}=3\frac{1}{3}$  是一致的,符合预期。

这个例子,只实现了加、乘、除三种运算。根据本例,不难写出更多的运 算符,以及自定义运算符。

根据本例,也不难写出神经网络的计算图,本质上是一样的。