

机器学习系统：设计和实现

麦络 董豪

清华大学出版社

内 容 简 介

近年来，机器学习技术被广泛用于各行各业，诞生了众多突破性的成果。其中，机器学习框架和相关系统作为机器学习技术的核心基础设施，受到众多科研人员和开发者的密切关注。本书为第一本由浅入深，通俗易懂地讲解机器学习框架设计和实现过程中所涉及的核心知识。

本书分为三大部分。其中，基础篇覆盖机器学习框架使用者所需要了解的核心系统知识和相关编程案例。进阶篇覆盖了机器学习框架开发者所需要理解的核心知识和相关实践案例。最后，拓展篇详细讨论了多种类的机器学习系统，从而为广大机器学习从业者提供解密底层系统所需的基础知识。

未经许可，不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。
版权所有，侵权必究。

图书在版编目 (CIP) 数据

机器学习系统：设计和实现 / 作者著.—北京：清华大学出版社，2021.9
ISBN 978-7-121-xxxxxx-x

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2020) 第 xxxxxx 号

责任编辑：

印 刷：

装 订：

出版发行：电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编：100036

开 本：787×980 1/16 印张： 字数： 千字

版 次：2021 年 10 月第 1 版

印 次：2021 年 10 月第 1 次印刷

定 价： 元

凡所购买清华大学出版社图书有缺损问题，请向购买书店调换。若书店售缺，请与本社发行部联系，联系及邮购电话：(010) XXXX, XXXX@XXXX。

质量投诉请发邮件至 XXXX@XXXX，盗版侵权举报请发邮件至 XXXX@XXXX。

本书咨询联系方式：(010) XXXX, XXXX@XXXX。

目录

作者简介	1
前言	3
基础篇	7
第 1 章 导论	9
1.1 机器学习应用	9
1.2 机器学习框架的设计目标	10
1.3 机器学习框架的基本组成原理	11
1.4 机器学习系统生态	13
1.5 图书结构和读者	15
第 2 章 编程模型	17
2.1 机器学习系统编程模型的演进	18
2.2 机器学习 workflow	19
2.2.1 环境配置	20
2.2.2 数据处理	20
2.2.3 模型定义	22
2.2.4 损失函数和优化器	23
2.2.5 训练及保存模型	23
2.2.6 测试和验证	25
2.3 定义深度神经网络	26
2.3.1 以层为核心定义神经网络	26
2.3.2 神经网络层的实现原理	30
2.3.3 自定义神经网络层	31

2.3.4	自定义神经网络模型	33
2.4	C/C++ 编程接口	34
2.4.1	在 Python 中调用 C/C++ 函数的原理	34
2.4.2	添加 C++ 编写的自定义算子	35
2.5	机器学习框架的编程范式	40
2.5.1	机器学习框架编程需求	40
2.5.2	机器学习框架编程范式现状	41
2.5.3	函数式编程案例	41
2.6	总结	42
2.7	拓展阅读	43
第 3 章	计算图	45
3.1	计算图的作用	45
3.2	计算图的基本构成	47
3.2.1	张量和算子	47
3.2.2	计算依赖	50
3.2.3	控制流	52
3.2.4	基于链式法则计算梯度	55
3.3	计算图的生成	57
3.3.1	静态生成	57
3.3.2	动态生成	59
3.3.3	动态和静态生成的比较	61
3.3.4	动态图与静态图的转换和融合	62
3.4	计算图的调度与执行	65
3.4.1	单算子调度执行	65
3.4.2	整图调度执行	66
3.4.3	数据载入同步与异步机制	68
3.5	总结	70
3.6	拓展阅读	71
进阶篇		73
第 4 章	AI 编译器和前端技术	75
4.1	AI 编译器设计原理	75
4.2	AI 编译器前端技术概述	78
4.2.1	中间表示	78

4.2.2	自动微分	78
4.2.3	类型系统与静态分析	79
4.2.4	前端编译优化	79
4.3	中间表示	79
4.3.1	中间表示的基本概念	79
4.3.2	中间表示的种类	80
4.3.3	机器学习框架的中间表示	82
4.4	自动微分	90
4.4.1	自动微分的基本概念	90
4.4.2	前向与反向自动微分	91
4.4.3	自动微分的实现	94
4.5	类型系统和静态分析	99
4.5.1	类型系统概述	99
4.5.2	静态分析概述	100
4.6	常见前端编译优化方法	101
4.6.1	前端编译优化简介	101
4.6.2	常见编译优化方法介绍及实现	101
4.7	总结	103
第 5 章	AI 编译器后端和运行时	105
5.1	概述	105
5.1.1	计算图优化	107
5.1.2	算子选择	107
5.1.3	内存分配	107
5.1.4	计算调度与执行	107
5.1.5	算子编译器	107
5.2	计算图优化	108
5.2.1	通用硬件优化	108
5.2.2	特定硬件优化	109
5.3	算子选择	111
5.3.1	算子选择的基础概念	111
5.3.2	算子选择的过程	115
5.4	内存分配	116
5.4.1	Device 内存概念	116
5.4.2	内存分配过程	117

5.4.3	内存复用	118
5.4.4	常见的内存分配优化手段	119
5.5	计算调度与执行	121
5.5.1	单算子调度	121
5.5.2	计算图调度	122
5.5.3	交互式执行	127
5.5.4	下沉式执行	130
5.6	算子编译器	131
5.6.1	算子调度策略	131
5.6.2	子策略组合优化	133
5.6.3	调度空间算法优化	136
5.6.4	芯片指令集适配	137
5.6.5	算子表达能力	139
5.6.6	相关编译优化技术	140
5.7	总结	140
5.8	拓展阅读	141
第 6 章	硬件加速器	143
6.1	概述	143
6.1.1	硬件加速器设计的意义	143
6.1.2	硬件加速器设计的思路	144
6.2	硬件加速器基本组成原理	144
6.2.1	硬件加速器的架构	144
6.2.2	硬件加速器的存储单元	146
6.2.3	硬件加速器的计算单元	147
6.2.4	DSA 芯片架构	148
6.3	加速器基本编程原理	150
6.3.1	硬件加速器的可编程性	150
6.3.2	硬件加速器的多样化编程方法	154
6.4	加速器实践	158
6.4.1	环境	158
6.4.2	广义矩阵乘法的朴素实现	158
6.4.3	提高运算强度	161
6.4.4	使用共享内存缓存复用数据	163
6.4.5	减少寄存器使用	165

6.4.6	隐藏共享内存读取延迟	166
6.4.7	隐藏全局内存读取延迟	167
6.4.8	与 cuBLAS 对比	167
6.4.9	小结	169
6.5	总结	169
6.6	拓展阅读	169
第 7 章	数据处理	171
7.1	概述	172
7.1.1	易用性	173
7.1.2	高效性	173
7.1.3	保序性	173
7.2	易用性设计	174
7.2.1	编程模型与接口	174
7.2.2	自定义算子支持	178
7.3	高效性设计	180
7.3.1	数据读取的高效性	181
7.3.2	数据计算的高效性	184
7.4	保序性设计	189
7.5	单机数据处理性能的扩展	190
7.5.1	基于异构计算的数据预处理	191
7.5.2	基于分布式的数据预处理	193
7.6	总结	194
第 8 章	模型部署	197
8.1	概述	197
8.2	训练模型到推理模型的转换及优化	198
8.2.1	模型转换	198
8.2.2	算子融合	200
8.2.3	算子替换	202
8.2.4	算子重排	203
8.3	模型压缩	204
8.3.1	量化	204
8.3.2	模型稀疏	206
8.3.3	知识蒸馏	208
8.4	模型推理	209

8.4.1	前处理与后处理	209
8.4.2	并行计算	211
8.4.3	算子优化	211
8.5	模型的安全保护	217
8.5.1	概述	217
8.5.2	模型混淆	217
8.6	总结	219
8.7	拓展阅读	220
第 9 章	分布式训练	221
9.1	设计概述	221
9.1.1	设计动机	221
9.1.2	系统架构	223
9.1.3	用户益处	223
9.2	实现方法	224
9.2.1	方法分类	224
9.2.2	数据并行	226
9.2.3	模型并行	227
9.2.4	混合并行	229
9.3	流水线并行	230
9.4	机器学习集群架构	231
9.5	集合通信	233
9.5.1	常见集合通信算子	233
9.5.2	基于 AllReduce 的梯度平均算法	236
9.5.3	集合通信算法性能分析	239
9.5.4	利用集合通信优化模型训练的实践	240
9.5.5	集合通信在数据并行的实践	241
9.5.6	集合通信在混合并行的实践	243
9.6	参数服务器	245
9.6.1	系统架构	245
9.6.2	异步训练	246
9.6.3	数据副本	247
9.7	总结	247
9.8	拓展阅读	248
拓展篇		249

第 10 章 联邦学习系统	251
10.1 概述	251
10.1.1 定义	251
10.1.2 应用场景	251
10.1.3 部署场景	252
10.1.4 常用框架	253
10.2 横向联邦学习	254
10.2.1 云云场景中的横向联邦学习	254
10.2.2 端云场景中的横向联邦学习	256
10.3 纵向联邦学习	257
10.3.1 纵向联邦学习架构	258
10.3.2 样本对齐	258
10.3.3 联合训练	260
10.4 隐私加密算法	261
10.4.1 基于 LDP 算法的安全聚合	261
10.4.2 基于 MPC 算法的安全聚合	262
10.4.3 基于 LDP-SignDS 算法的安全聚合	263
10.5 展望	265
10.5.1 异构场景下的联邦学习	265
10.5.2 通信效率提升	266
10.5.3 联邦学习生态	267
10.6 总结	267
第 11 章 推荐系统	269
11.1 系统基本组成	269
11.1.1 消息队列	270
11.1.2 特征存储	271
11.1.3 稠密神经网络	271
11.1.4 嵌入表	272
11.1.5 训练服务器	273
11.1.6 参数服务器	274
11.1.7 推理服务器	274
11.2 多阶段推荐系统	274
11.2.1 推荐流水线概述	275
11.2.2 召回	275

11.2.3 排序	277
11.3 模型更新	280
11.3.1 持续更新模型的需求	280
11.3.2 离线更新	281
11.4 案例分析：支持在线模型更新的大型推荐系统	283
11.4.1 系统设计挑战	283
11.4.2 系统架构	284
11.4.3 点对点模型更新传播算法	285
11.4.4 模型更新调度器	287
11.4.5 模型状态管理器	288
11.4.6 小结	289
11.5 总结	290
11.6 扩展阅读	290
第 12 章 强化学习系统	291
12.1 强化学习介绍	291
12.2 单节点强化学习系统	293
12.3 分布式强化学习系统	295
12.4 多智能体强化学习	298
12.5 多智能体强化学习系统	301
12.6 总结	305
第 13 章 可解释 AI 系统	307
13.1 背景	307
13.2 可解释 AI 定义	308
13.3 可解释 AI 算法现状介绍	309
13.3.1 数据驱动的解释	310
13.3.2 知识感知的解释	312
13.4 常见可解释 AI 系统	315
13.5 案例分析：MindSpore XAI	316
13.5.1 为图片分类场景提供解释	316
13.5.2 为表格数据场景提供解释	318
13.5.3 白盒模型	319
13.6 未来研究方向	320
13.7 总结	320

第 14 章 机器人系统	323
14.1 机器人系统概述	323
14.1.1 感知系统	324
14.1.2 规划系统	325
14.1.3 控制系统	326
14.1.4 机器人安全	327
14.2 机器人操作系统	330
14.2.1 ROS2 节点	331
14.2.2 ROS2 主题	332
14.2.3 ROS2 服务	332
14.2.4 ROS2 参数	332
14.2.5 ROS2 动作	333
14.3 案例分析：使用机器人操作系统	334
14.3.1 创建节点	337
14.3.2 读取参数	344
14.3.3 服务端-客户端服务模式	345
14.3.4 客户端	349
14.3.5 动作模式	351
14.3.6 动作客户端	354
14.4 总结	357

作者简介

麦 络 爱丁堡大学信息学院助理教授，领导大规模计算系统科研团队。麦络于 2018 年和 2012 年在英国帝国理工学院分别获得博士学位和硕士学位，2011 年在西安电子科技大学获得本科学位。麦络的研究兴趣包括了：计算机系统、分布式系统、机器学习系统和大数据计算。

董 豪 北京大学计算机学院助理教授、鹏城实验室双聘成员。董豪于 2019 年秋获得英国帝国理工学院计算机系博士学位，在此之前于英国帝国理工学院和英国中央兰开夏大学获得一等研究生和一等本科学位。

前言

缘起

我在 2020 年来到了爱丁堡大学信息学院，爱丁堡大学是 AI (Artificial Intelligence, 人工智能) 研究的发源地之一，很多学生慕名而来学习机器学习技术。爱丁堡大学拥有许多出色的机器学习课程 (如自然语言处理、计算机视觉、计算神经学等)，同时也拥有一系列关于计算机系统的基础课程 (如操作系统、编程语言、编译器、计算机体系架构等)。但是当我在教学的过程中问起学生：机器学习是如何利用计算机系统实现计算加速和部署？许多学生会投来疑惑的眼神。这促使我思考在爱丁堡大学乃至其他世界顶尖大学的教学大纲中，是不是缺一门衔接机器学习和计算机系统的课程。

我的第一反应是基于一门已有的课程来进行拓展。那时，加州大学伯克利分校的 AI Systems (人工智能系统) 课程较为知名。这门课描述了机器学习系统的不同研究方向，内容以研读论文为主。可惜的是，许多论文已经无法经受住时间的检验。更重要的是，这门课缺乏对于知识的整体梳理，未能形成完整的知识体系架构。学习完这门课程，学生未能对于从头搭建机器学习系统有明确的思路。我将目光投向其他学校，华盛顿大学曾短期开过 Deep Learning Systems (深度学习系统) 课程，这门课程讲述了机器学习程序的编译过程。而由于这门课程以讲述 Apache TVM 深度学习编译器为主要目的，对于机器学习系统缺乏完整的教学。另外，斯坦福大学的课程 Machine Learning Systems Design (机器学习系统设计) 因为课程设计人的研究领域以数据库为主，因此该课程专注于数据清洗、数据管理、数据标注等主题。

当时觉得比较合适的是微软亚洲研究院的 AI Systems 课程。这门课程讲述了机器学习系统背后的设计理念。但是当我准备将其教授给本科生的时候，我发现这门课对于机器学习系统核心理念讲解得很浅，同时要求学生有大量计算机系统的背景知识，实际上它更适合教授给博士生。上述的课程共同问题是：其课程结构都以研读相关论文为主，因此教授的内容都是高深和零散的，而不是通俗易懂，知识脉络清晰的教科书，这给学习机器学习系统造成了极大的困难。

回首 2020 年，我们已经拥有了优秀的操作系统、数据库、分布式系统等基础性教材。同时，在机器学习相关算法方面也有了一系列教材。然而，无论是国内外，我很难找到一本系统性讲述

机器学习系统的教材。因此，许多公司和高校实验室不得不花费大量的人力和物力从头培养学生和工程师，使他们加强对于机器学习底层基础设施的认识。这类教材的缺乏已经制约了高校的人才培养，不利于高校培养出符合业界学界和时代发展的人才了。因此，我开始思考：我们是不是应该推出一本机器学习系统的教科书了呢？

开端

带着写书的构想，我开始和朋友沟通。大家都非常认可编写这类书的巨大价值，但是现实的情况是：很少有人愿意做这么一件费力的事情。我当时的博士后导师也劝我：你现在处在教职生涯的初期，追求高影响力的学术论文是当务之急，写一本书要耗费大量的时间和精力，最后可能也无法出版面世。而我和同行交流时也发现：他们更愿意改进市面上已经有的教科书，即做有迹可循的事情，而不是摸着石头过河，做从无到有的事情。特别是对于机器学习系统这个快速发展，频繁试错的领域，能不能写出经受时间检验的书也是一个未知数。

考虑到写作的巨大挑战，我将写书的想法藏于心中，直到一次回国和 MindSpore 的架构师金雪峰聊天。和雪峰的相识大约是在 2019 年的圣诞节，雪峰来伦敦访问，他正在领导 MindSpore 的开发（当时 MindSpore 1.0 还没有发布）。而对于机器学习系统的开发，我也有很深的兴趣。我在 2018 年也和好友一起从头搭建一个机器学习框架（类似于 PyTorch），虽然最终资源不足无疾而终，不过许多的思考成就了我之后发表的多篇机器学习系统论文。和雪峰聊起来，我们都对 AI 系统开发之难深有同感。我们共同的感慨就是：找到懂机器学习系统开发的人太难了。现今的学生都一心学习机器学习算法，很多学生对于底层的运作原理解得很浅。而当他们在实际中应用机器学习技术时才意识到系统的重要性，那时想去学习，却没有了充沛的学习时间。我对雪峰苦笑道：“我是准备写一本机器学习系统教材的，但是可能还要等 3, 4 年才能完成。”雪峰说：“我也有这个想法啊。你要是写的话，我能帮助到你吗？”

这句话点醒了我。传统的图书写作，往往依赖于一，两个教授将学科十余年的发展慢慢总结整理成书。这种模式类似于传统软件开发的瀑布流方式。可是，在科技的世界，这已经变了！软件的发展从传统的瀑布流进化到如今的开源敏捷开发。而图书的写作为什么还要停留在传统方式呢？MXNet 开源社区编写的专注于深度学习算法的图书 *Deep Dive into Deep Learning* 就是一个很好的例子啊。我因此马上找到当年一起创立 TensorLayer 开源社区的小伙伴：北京大学的董豪，我们一拍即合，说干就干。雪峰也很高兴我和董豪愿意开始做这件事，也邀请了他的同事干志良来帮忙。我们终于开始图书的写作了！

经过几轮的讨论，我们将书名定为《机器学习系统：设计和实现》。我们希望通过教给学生机器学习系统设计原理，同时也为学生提供大量的系统实现经验分享，让他们在将来工作和科研中遇到实际问题知道该如何分析和解决。

社区的构建

考虑到机器学习系统本身就是一个不断发展并且孕育细分领域的学科。我从一开始就在思考：如何设计一个可扩展（Scalable）的社区架构保证这本书的可持续发展呢？因为我专注于大规模软件系统，故决定借鉴几个分布式系统的设计要点构建社区：

- (1) **预防单点故障和瓶颈：**现代分布式系统往往采用控制层和数据层分离的设计避免单点故障和瓶颈。那么我们在设计高度可扩展的写作社区的时候也要如此。因此，我们设计了如下分布式机制：编辑决定花最多的时间来寻找优秀的、主动的、负责的书稿章节负责人。章节负责人可以进一步寻找其他作者共同协作。章节负责人和章节作者进行密切的沟通，按照给定时间节点，全速异步推进。编辑和章节负责人设定了每周讨论同步写作的进展，确保并行完成的章节内容质量能够持续符合编辑和社区的预期。
- (2) **迭代式改进：**深度学习的优化算法随机梯度下降本质上是在复杂问题中利用局部梯度进行海量迭代，最终找到局部最优解。因此我利用了同样的思路设计图书质量的迭代提高。我们首先在 Overleaf 上写好书籍的初版（类似于初始参数）。接下来，将图书的内容做成标准的 Git 代码仓库。建立机制鼓励开源社区和广大读者开启 GitHub 问题（Issue）和拉取请求（Pull Request, PR），持续改进图书质量，而我们设置好完善的书籍构建工具、持续集成工具、贡献者讨论会等，就可以让图书的质量持续提高实现随机梯度下降（Stochastic Gradient Descent）一样的结果最优性。
- (3) **高可用性：**构建 7×24 小时在线的写作平台，让图书参与者可以在全球任何时区、任何语言平台下都能参与开发图书，倾听社区的反馈。因此将 Git 仓库放置在 GitHub 上，并准备之后在 Gitee 做好镜像。这样，就搭建了一套高可用的写作平台了。
- (4) **内容中立：**一个分布式系统要能长久运行，其中的每一个节点都要同等对待，遇到故障才能用统一的办法进行故障恢复。考虑到图书写作中的故障（设计无法经受时间检验，写作者中途不得不退出等）可能来源于方方面面，我们让不同背景的参与者共同完成每一个章节，确保写出中立、客观、包容的内容，并且写作不会因为故障而中断。

现状和未来

机制一旦建立好，写作就自动化地跑起来了，参与者也越来越多，我带过的学生袁秀龙、丁子涵、符尧、任杰、梁文腾也很用心参与编写，董豪邀请了鹏城实验室的韩佳容和赖钺，志良邀请了许多 MindSpore 的小伙伴进来做贡献，许多资深的机器学习系统设计者也和我们各个渠道展开讨论，提供了非常多宝贵的写作建议。另外，学界和产业界的反响也很热烈。海外很多优秀的学生（斯坦福大学的孙建凯、卡耐基梅隆大学的廖培元、**剑桥大学的王瀚宸**、爱丁堡大学的穆沛），产业界的朋友（英国葛兰素史克公司机器学习团队的肖凯严）都加入了我们的写作。同

时，学界的教授（英国伦敦帝国理工学院的 Peter Pietzuch 教授、香港科技大学的陈雷教授等）也持续给我们提供了写作意见，改进了图书质量。

充分发动了“分布式系统”的力量后，图书的内容得以持续高质量地添加。当我们开源了图书以后，图书的受众快速增长，GitHub 上关注度的增长让我们受宠若惊。在社区的推动下，图书的中文版、英文版、阿拉伯语版都已经开始推进。这么多年来，我第一次意识到我在分布式系统和机器学习中学习到的知识，在解决现实复杂问题的时候是如此的有用！

很多时候，当我们面对未知而巨大的困难时，个人的力量真的很渺小。而和朋友、社区一起就变成了强大的力量，让我们鼓起勇气，走出了最关键的第一步！希望我的一些思考，能给其他复杂问题的求解带来一些小小的启发。

截止 2022 年 5 月，本书的核心作者和编辑包括麦络、董豪、金雪锋和干志良，书籍策划是谭志鹏。本书各章节由以下作者参与编写：**导论**（麦络、董豪、干志良）、**编程模型**（赖铨、麦络、董豪）、**计算图**（韩佳容、麦络、董豪）、**AI 编译器和前端技术**（梁志博、张清华、黄炳坚、余坚峰、干志良）、**AI 编译器后端和运行时**（褚金锦、穆沛、蔡福璧）、**硬件加速器**（张任伟、任杰、梁文腾、刘超、陈钢、黎明奇）、**数据处理**（袁秀龙）、**模型部署**（韩刚强、唐业辉、翟智强、李姗姗）、**分布式训练**（麦络、廖培元）、**联邦学习系统**（吴天诚、王瀚宸）、**推荐系统**（符尧、裴贝、麦络）、**强化学习系统**（丁子涵）、**可解释 AI 系统**（李昊阳、李小慧）、**机器人系统**（孙建凯、肖凯严）。

最后，我们非常欢迎新成员的加入以提升书籍质量，扩展内容。感兴趣的读者可以通过书籍的 GitHub 社区¹ 联系我们。我们非常期待和大家一起努力，编写出一本推动业界发展的机器学习系统图书！

麦络
英国爱丁堡
2022 年 5 月 4 日

¹可参考网址为: <https://github.com/openmlsys/>