# PyTorch 内核机制

PyTorch 的构建者表明，Pytorch 的哲学是解决当务之急，也就是说即时构建和运行我们的计算图。这恰好适合 Python 的编程理念，一边定义就可以在 Jupyter Notebook 一边运行，因此，PyTorch 的工作流程非常接近于 Python 的科学计算库 NumPy。

Christian 表明 PyTorch 之所以这么方便，很多都是因为它的「基因」——内部运行机制决定的。这一篇报告并不会介绍如何使用 PyTorch 基础模块，或如何用 PyTorch 训练一个神经网络，Christian 关注的是如何以直观的形式介绍 PyTorch 的内核机制，即各个模块到底是怎么工作的。

Christian 在 Reddit 表示这一次报告由于录像问题并不能上传演讲视频，因此暂时只能分享演讲 PPT。不过 Christian 最近也会再做一次该主题的演讲，所以我们可以期待下次能有介绍 PyTorch 的视频。

- 演讲 PPT 地址：https://speakerdeck.com/perone/pytorch-under-the-hood
- 百度云地址：https://pan.baidu.com/s/1aaE0I1geF7VwEnQRwmzBtA

如下所示为这次演讲的主要议程，它主要从张量和 JIT 编译器出发介绍底层运行机制：

*Agenda*

TENSORS
- Tensors
- Python objects
- Zero-copy
- Tensor storage
- Memory allocators (CPU/GPU)
- The big picture

JIT
- Just-in-time compiler
- Tracing
- Scripting
- Why TorchScript ?
- Building IR and JIT Phases
- Optimizations
- Serialization
- Using models in other languages

PRODUCTION
- Some tips

Q&A

在讨论 PyTorch 的各组件机制前，我们需要了解整体工作流。PyTorch 使用一种称之为 imperative / eager 的范式，即每一行代码都要求构建一个图以定义完整计算图的一个部分。即使完整的计算图还没有完成构建，我们也可以独立地执行这些作为组件的小计算图，这种动态计算图被称为「define-by-run」方法。

其实初学者了解到整体流程就可以学着使用了，但底层机制有助于对代码的理解和掌控。

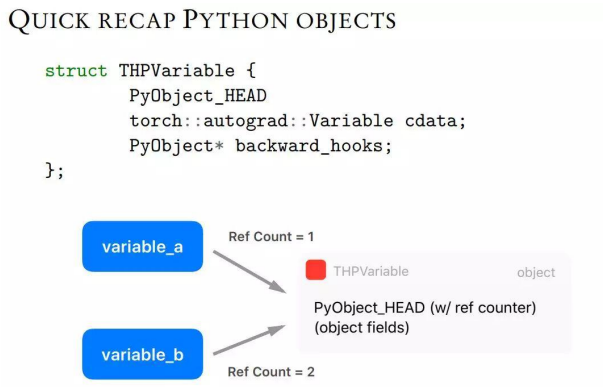
## 张量

在概念上，张量就是向量和矩阵的推广，PyTorch 中的张量就是元素为同一数据类型多维矩阵。虽然 PyTorch 的接口是 Python，但底层主要都是用 C++实现的，而在 Python 中，集成 C++代码通常被称为「扩展」。

因为张量主要承载数据，并进行计算。PyTorch 的张量计算使用最底层和基本的张量运算库 ATen，它的自动微分使用 Autograd，该自动微分工具同样建立在 ATen 框架上。

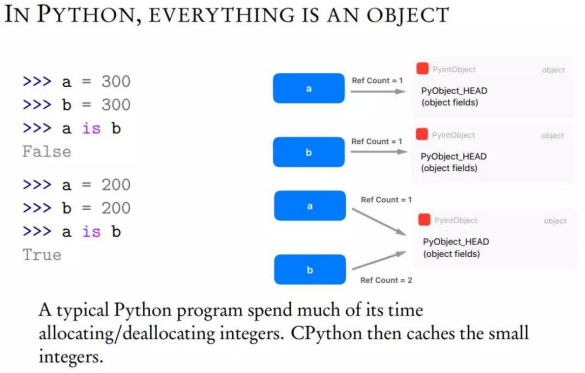
## Python 对象

为了定义 C/C++中一个新的 Python 对象类型，你需要定义如下 THPVariable 类似结构。其中第一个 PyObject_HEAD 宏旨在标准化 Python 对象，并扩展至另一个结构，该结构包含一个指向类型对象的指针，以及一个带有引用计数（ref count）的字段。



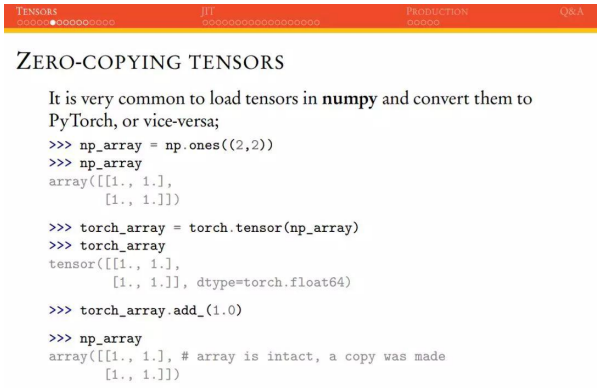

Python API 中有两个额外的宏，分别称为 Py_INCREF() 和 Py_DECREF()，可用于增加和减少 Python 对象的引用计数。

在 Python 中，任何东西都是对象，例如变量、数据结构和函数等。

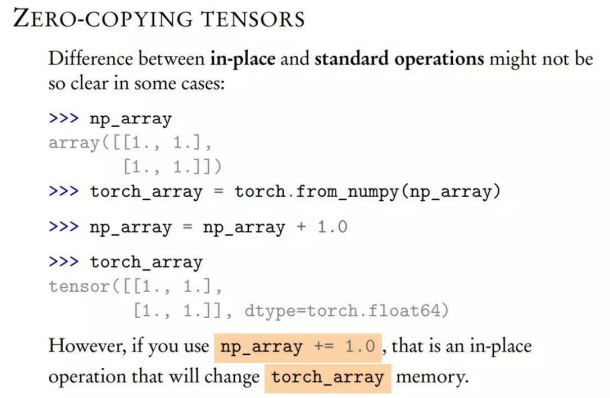


## ZERO-COPYING 张量

由于 Numpy 数组的使用非常普遍，我们确实需要在 Numpy 和 PyTorch 张量之间做转换。因此 PyTorch 给出了 from_numpy() 和 numpy() 两个方法，从而在 NumPy 数组和 PyTorch 张量之间做转换。




因为张量储存的成本比较大，如果我们在上述转换的过程中复制一遍数据，那么内存的占用会非常大。PyTorch 张量的一个优势是它会保留一个指向内部 NumPy 数组的指针，而不是直接复制它。这意味着 PyTorch 将拥有这一数据，并与 NumPy 数组对象共享同一内存区域。




Zero-Copying 的形式确实能省很多内存，但是如上所示在位（in-place）和标准运算之间的区别会有点模糊。如果用 np_array = np_array +1.0，torch_array 的内存不会改变，但是如果用 np_array += 1.0，torch_array 的内存却又会改变。

## CPU/GPU 内存分配

张量的实际原始数据并不是立即保存在张量结构中，而是保存在我们称之为「存储（Storage）」的地方，它是张量结构的一部分。一般张量存储可以通过 Allocator 选择是储存在计算机内存（CPU）还是显存（GPU）。

MEMORY ALLOCATORS (CPU/GPU)

- The tensor storage can be allocated either in the CPU memory or GPU, therefore a mechanism is required to switch between these different allocations:

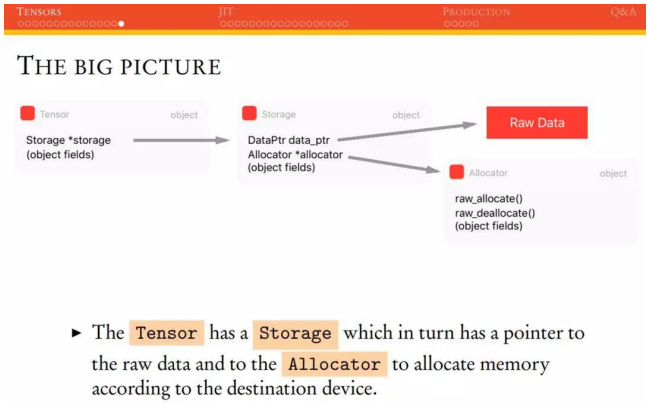
```
struct Allocator {
    virtual ~Allocator() {}
    virtual DataPtr allocate(size_t n) const = 0;
    virtual DeleterFnPtr raw_deleter() const {...}
    void* raw_allocate(size_t n) {...}
    void raw_deallocate(void* ptr) {...}
};
```

- There are `Allocator`s that will use the GPU allocators such as `cudaMallocHost()` when the storage should be used for the GPU or `posix_memalign()` POSIX functions for data in the CPU memory.

PyTorch under the hood - Christian S. Perone (2019)

**THE BIG PICTURE**

最后，PyTorch 主张量 THTensor 结构可以展示为下图。THTensor 的主要结构为张量数据，它保留了 size/strides/dimensions/offsets/等信息，同时还有存储 THStorage。

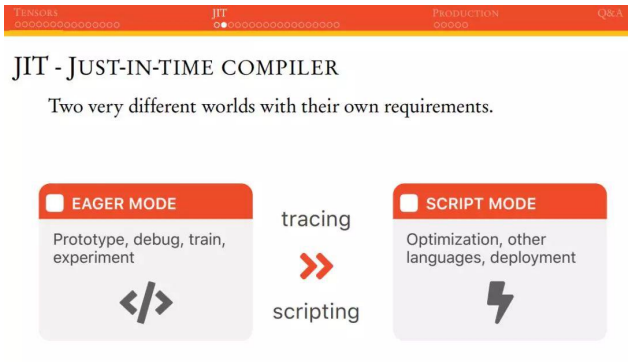



- The `Tensor` has a `Storage` which in turn has a pointer to the raw data and to the `Allocator` to allocate memory according to the destination device.

**JIT**

因为 PyTorch 是即时运行模式，这表明它很容易 Debug 或检查代码等。在 PyTorch 1.0 中，其首次引进了 torch.jit，它是一组编译工具，且主要目标是弥补研究与产品部署的差距。JIT 包含一种名为 Torch Script 的语言，这种语言是 Python 的子语言。使用 Torch Script 的代码可以实现非常大的优化，并且可以序列化以供在后续的 C++API 中使用。

如下所示为常见使用 Python 运行的 Eager 模式，也可以运行 Script 模式。Eager 模式适合块做原型与实验，而 Script 模式适合做优化与部署。

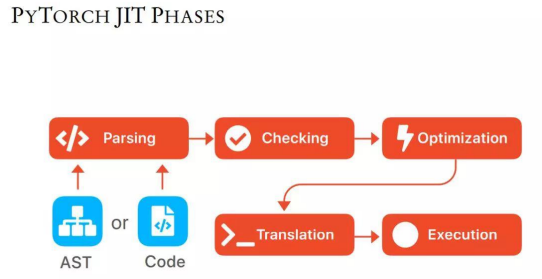



那么为什么要用 TORCHSCRIPT 呢？Christian 给出了以下理由：

- The concept of having a well-defined **Intermediate Representation** (IR) is very powerful, it's the main concept behind LLVM platform as well;
- This opens the door to:
  - Decouple the model (computationl graph) from Python runtime;
  - Use it in production with C++ (no GIL) or other languages;
  - Capitalize on optimizations (whole program);
  - Split the development world of hackable and easy to debug from the world of putting these models in production and optimize them.

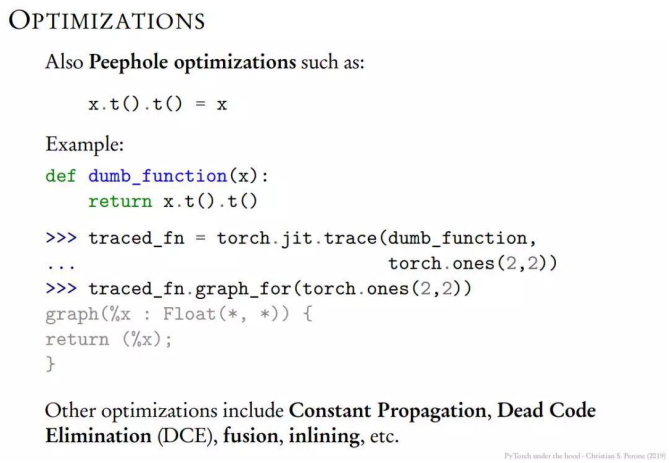
**PyTorch JIT 主要过程**

如下所示 JIT 主要会输入代码或 Python 的抽象句法树（AST），其中 AST 会用树结构表征 Python 源代码的句法结构。解析可能是解析句法结构和计算图，然后语法检测接连着代码优化过程，最后只要编译并执行就可以了。




其中优化可以用于模型计算图，例如展开循环等。在如下所示的 Peephole 优化中，编译器仅在一个或多个基本块中针对已生成的代码，结合 CPU 指令的特点和一些转换规则提升性能。Peephole 优化也可以通过整体分析和指令转换提升代码性能。

如下所示矩阵的两次装置等于矩阵本身，这应该是需要优化的。




## 执行

和 Python 解释器可以执行代码一样，PyTorch 在 JIT 过程中也有一个解释器执行中间表征指令：

```
bool runImpl(Stack& stack) {
    auto& instructions = function->instructions;
    size_t last = instructions.size();

    while (pc < last) {
      auto& inst = instructions[pc];
      try {
        loadTensorsFromRegisters(inst.inputs, stack);
        size_t new_pc = pc + 1 + inst.callback(stack);
        for (int i = inst.outputs.size - 1; i >= 0; --i) {
          int reg = get(inst.outputs, i);
          registers[reg] = pop(stack);
        }
        pc = new_pc;

        // (...) omitted
```

最后，Christian 还介绍了很多内部运行机制，不过因为它们都很难，而且暂时没有提供视频讲解，读者大牛们可以看看具体 PPT 内容。