如何理解神经网络——信息量、压缩与智能

gtj

2025年3月9日

目录

1	从函数拟合开始	3
	1.1 最简单的规律——简单线性回归	. 3
	1.2 多项式拟合	. 9
	1.3 高维的线性拟合	. 15
2		24
	2.1 逻辑门	. 24
	2.2 程序是怎么执行起来的	. 27
	2.3 那么,GPU 呢?	. 40
	2.4 位运算与bit-flag	. 41
3	神经网络:一个大的函数	41
	3.1 知道目标就可以拟合了?	. 41
	3.2 激活函数与非线性	. 41
	3.3 神经网络的训练	. 41
	3.4 如果不知道目标,只知道回报呢?	. 41
4	泛化性:一个矛盾	41
	4.1 过拟合与欠拟合	. 41
	4.2 网络的大小好像小于训练数据?哪来的泛化性	. 41
	4.3 训练好像被卡住了——香农极限	. 41
5	你能猜到一句话接下来要说什么?	41
	51 什么是"废话"?	41

	5.2	jpeg虽然有损,但为什么说是极其成功的? 4	1
	5.3	熵与压缩	1
	5.4	马尔可夫链 4	1
6	压缩	即 <mark>智能</mark> 4	2
	6.1	你是如何看出对面的人心情怎么样的?	12
	6.2	压缩的极限——区分能力的边界	12
	6.3	从母语词汇看对事物的认识4	12
	6.4	压缩的本质 4	12
7	潜空	间:更适合机器人的编码方式 4	2
	7.1	潜空间是什么?	12
	7.2	高维空间的维数灾难 4	12
	7.3	"空空"的空间的另一面——维数远不是储存能力的极限 4	12
8	但是	,代价是什么:可解释性的地狱 4	2
	8.1	想想什么是"解释"? 4	12
	8.2	神经网络不能很好地被解释 4	12
9	再论	·····································	2
	9.1	全连接网络	12
	9.2	循环神经网络	12
	9.3	卷积神经网络	12
	9.4	深度学习与残差链接	12
	9.5	transformer	12
	9.6	自编码器与扩散模型 4	12
	9.7	仿人的架构——专家模型4	12
10	杂谈	4	.3
	10.1	矩阵式研究——场景与模型的排列组合	13
	10.2	AI圈的常见行话 4	13
	10.3	AI——生产力还是毁灭?	13
	10 4	新人类与自由意志?	13

1 从函数拟合开始

1.1 最简单的规律——简单线性回归

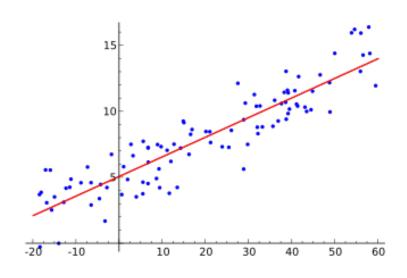


图 1: 线性回归示意图

图源: Wikipedia

Linear Regression Acgression Linear Fitting Linear Stitling 虽然 线性回归 的名字叫做 "回归",但是事实上我更喜欢叫做 线性拟合。它的目的是找到一条直线尽可能"贴近"数据点。在这一基础上,我们可以发现数据之间的规律,从而做出一些预测。不过这里有几个问题:

- 为什么要用直线? 为什么不用曲线?
- 为什么要用直线拟合数据点?这有什么用?
- "贴近"数据点的标准是什么?为什么要选择这个标准?

我认为用直线的原因无非两点: 一是直线 y = kx + b 简单且意义明确,又能处理不少的问题。几何上直线作为基本对象,尺子就能画出; 代数上只需要加减乘除,一次函数我们也很早就学过了。而它的思想一路贯穿到了微积分的导数并延申到了线性代数。二是许多曲线的回归可以转为线性回归(见后文)。例如指数型的 $y = ke^{\alpha x}$ 取对数变为 $z = \alpha x + \ln k$,又如分式型的 $y = (\alpha x + \beta)^{-1}$ 取倒数转化为 $z = \alpha x + \beta$,从而归结为线性 拟合。因此带着线性拟合经验再去考虑曲线会更轻松。

至于其意义: 一是找到数据的规律,二是做出预测。拟合的系数可以用于测算数据之 Marginal Benefit 间的关系,斜率 k 表明输出对输入的敏感程度。一个经典例子是广告投放的 边际效益 1 ,

¹边际效益:经济学概念,每增加单位投入,产出会增加多少单位

在一定范围内拟合收益与投入的关系,可以估算当前的边际效益,从而决定是否继续投放。而物理上,比值定义法定义的各种物理量,如电阻、电容等,最常用的测算方式都是线性拟合。例如测量电源输出的若干组电压和电流数据,并拟合出直线,斜率的绝对值是电源的内阻,同时截距顺带给出了电源的电动势,这样测得的数据就可以用于预测电源的输出情况。对我们所处的世界有定量的认识是科学的基础。可测量的数据和数学模型来描述、解释和预测自然现象是科学的基本方法,也是拟合的根本目的。

既然有了基本思路,那么如何选择"贴近"的标准呢?直接去度量一堆散点和直线的接近程度多少有点霰弹枪²打移动靶的感觉,但是我们总是可以计算子弹打到了几环。换Residual 言之,两个相差的部分才是关键的,**残差**的概念由此产生。取出每个点实际值和拟合值的差,就得到了这样一个列表³(其中根据拟合函数 $\hat{y}_i = kx_i + b$ 计算出预测值):

$$\mathbf{r} = [r_1, r_2, \dots, r_n] = [y_1 - \hat{y}_1, y_2 - \hat{y}_2, \dots, y_n - \hat{y}_n]$$

度量数据点与直线间偏差这一问题就转为了度量残差与 0 的偏差。还记得勾股定理吗?直角坐标系内一点到 0 的距离是坐标平方和的平方根,只不过这里残差列表是个 n 维的向量,度量它偏离原点的程度就是向量的 模。这个模越小,说明拟合的效果越好。这样我们就自然地引入了度量拟合效果的量化标准,不过实际应用中出于方便(特别是计算上的方便),通常省去开根号的一步,直接采用残差的平方和,此外还会除以样本点数得Mean Squared Error到"平均"的残差平方。习惯上称之为 均方误差 (MSE):

$$MSE = \frac{1}{n} |\mathbf{r}|^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} r_i^2$$

在踏出下一步之前,我想这里有一点点思考的空间。例如:

• 为什么要用平方和而不是直接相加呢?

这是因为直接相加会有正负相互抵消的可能,度量出的偏差为 0 甚至为负实在是不合理,因此至少要保证每一项都是正数。但是这又引出下一个问题。

• 为什么不用绝对值呢? 绝对值也是正的啊。

从正态分布的角度看,选用平方和自有它的<u>道理</u>。但是即使读者并不熟悉这些统计的背景,也可以从另一个角度理解:平方和的确是一个更好的度量方式,因为它对大的偏差更加敏感。例如一个残差为2的点和一个残差为4的点,直接绝对值相

²霰弹枪:一种枪,射出的子弹像雨点一样散开

³记号说明:对于变量,无论是一维变量还是多维变量,一律采用斜体。对于具体的数据点,视是否为向量决定使用黑体还是斜体。例如 $r=y-\hat{y}$ 表示的是方程,所以全部采用斜体。但是具体数据的残差计算,例如 $\mathbf{r}=\mathbf{y}-\hat{\mathbf{y}}$,是对数据点的向量运算,所以采用正体。

加的话是 6,在这里残差为 4 的点贡献了 $4/6 \approx 66.7\%$ 的偏差。而它们的平方和是 $2^2 + 4^2 = 20$,残差为 4 的点贡献提升到了 $4^2/20 = 80\%$,更加凸显出了 4 的偏差,反映了我们更"关注"这一大偏差的想法,更符合通常对"偏差"的直观认识。

• 为什么要除以样本点数 n 呢?

一方面是为了跨数据集比较,数据集的大小通常有区别,就像买东西的重量。这正如不能光看价格不看质量就评价 5 元 2 斤的苹果贵还是 3 元 1 斤的苹果贵,因此需要一个"单位"来衡量。另一方面,看完下一个问题你就会明白其中的精妙之处。

• 这里直接把所有的残差平方加了起来,但如果有的点重要一些怎么办?

先说明一下这样的需求并非空想,有时测量条件决定了不同点的可靠性并不相同。以一个精度 1% 的表为例,测量得到 1.00, 2.00, 3.00 时它们本身允许的误差分别是 0.01, 0.02, 0.03,而非相同。也就是说我们会觉得 1.00 的测量值从残差的大小上⁴更为可靠,这时似乎应该衡量一下点的"重要性"。如果你想说一个点很重要怎么办?直观上来讲你可能会想把它重复几遍,例如如果你很关心 r_1 ,你可能会想,这还不简单吗?在误差列表中把 r_1 重复 3 遍就好,就像这样:

Refined
$$\mathbf{r} = [r_1, r_1, r_1, r_2, r_3, \dots, r_n]$$

这时再计算均方误差呢,变成了 n+2 个点,一种我们设想的"改善的"均方误差公式就变成了这样:

Refined MSE =
$$\frac{1}{n+2} \left(2r_1^2 + \sum_{i=1}^{n+2} r_i^2 \right)$$

只不过这样的方式无疑有点"笨重",再仔细想想呢?如果把 1/(n+2) 乘到每一项上,就像这样:

Refined MSE =
$$\frac{3}{n+2}r_1^2 + \frac{1}{n+2}r_2^2 + \dots + \frac{1}{n+2}r_{n+2}^2$$

再对照着上面的列表看一看,3/(n+2) 不正好表明在大小为 n+2 的列表中 r_1 出现 r_2 Weight 了 3 此吗?频次就这样和权重(系数)联系起来了。我们也没必要守着重复 3 次或者 5 次这种固定的规则——至少自然可没有限制重要性之间的比例刚好是整数。这样一来只需要一个权重列表就可以了,权重乘在残差平方前,这就引出了 **加权误差**,大权重表示更重要,略微改写一下公式得到:

Weighted MSE =
$$\sum_{i=1}^{n} w_i r_i^2$$

Absolute Error ⁴残差的大小: 严谨的说称作 绝对误差

这里为了方便起见,假设了权重的和为 1,即 $\sum_{i=1}^{n} w_i = 1$,如果不为 1,可以先计算误差再除以权重的和。由此可以根据实际情况调整不同点的重要性,也可以看出,之前的均方误差不过是因为在 n 个数中每个残差变量都出现了 1 次,所以权重都设为了 1/n。在重要性可变时,加权均方误差无疑提供了一种更加"通用" Measurement Metrics 的 度量方式 。

使用的工具已经准备好了,目标也已经明确了,那么可以开始拟合了。当然,为了简 \hat{k},\hat{b} 使用的工具已经准备好了,目标也已经明确了,那么可以开始拟合了。当然,为了简 \hat{k},\hat{b} 使得均 单起见,这里还是只考虑无权重的情况。我们要做的是找到一组最优的参数值 \hat{k},\hat{b} 使得均 方误差最小,从这一点可以窥见贯穿整个机器学习的核心思想——最小化损失(误差)。形 式上,公式会这么写:

$$\hat{k}, \hat{b} = \operatorname*{arg\,min}_{k,b} \mathrm{MSE} = \operatorname*{arg\,min}_{k,b} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - kx_i - b)^2$$

但是它并没有那么神秘: arg 是 argument 的缩写 5 , min 则是 minimize 的缩写。上面 Find the parameter values k,b that minimize the MSE 的式子完全可以读作 "找到参数值 \hat{k},\hat{b} 使得均方误差最小 "。虽然项很多,但这本是上只是一个二次函数,所以无论是配方法、对 k,b 分别求导还是使用矩阵方法,都可以很容易地求解。不过我很喜欢另一个较少被人提及的视角——从线性代数和几何的角度来看待这个问题。我们回头看看残差的表达式:

$$\mathbf{r} = [r_1, r_2, \dots, r_n]$$

$$= [y_1 - (kx_1 + b), y_2 - (kx_2 + b), \dots, y_n - (kx_n + b)]$$

$$= [y_1, y_2, \dots, y_n] - (k[x_1, x_2, \dots, x_n] + b[1, 1, \dots, 1])$$

我们暂时用一个这样的记号,记拟合所用的函数在这些数据点上的取值

$$\mathbf{x}^{0} = [1, 1, \dots, 1]$$

 $\mathbf{x}^{1} = [x_{1}, x_{2}, \dots, x_{n}]$

并记输出 $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]$,那么残差就可以写成 $\mathbf{r} = \mathbf{y} - (k\mathbf{x}^1 + b\mathbf{x}^0)$ 。这样一来,我们的目标是找到 k, b 使得 \mathbf{r} 的模最小。写到这里,从代数上看可能依然不够直观,让我们换个角度看看。

 $^{^5}$ Argument: 自变量,数学优化中函数的输入变量。然而 arg min 中的 arg 仅仅表明在优化算法看来 k, b 是可变的、待优化的自变量。但是从拟合模型外看过去,它们是固定的参变量,通常意义上仍称作 Parameter。这里 Argument 与 Parameter 的区别一定程度上体现了视角的转换。

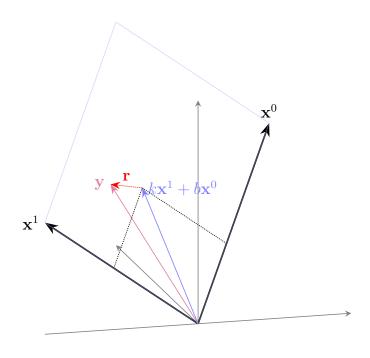


图 2: 从几何的角度看残差

从几何上, $k\mathbf{x}^1 + b\mathbf{x}^0$ 落在 \mathbf{x}^0 与 \mathbf{x}^1 确定的平面上,求 $\mathbf{r} = \mathbf{y} - (k\mathbf{x}^1 + b\mathbf{x}^0)$ 的最小值 实际上就是从点向平面做垂线并求垂线长。平面上的点恰好表示了那些可以精准拟合的数 据,而偏离平面的部分则暗示了无论怎么用直线拟合都会有误差。不得不说从几何上看确 实清晰很多,事实上也有人从几何角度给出了推导,不过掠过这些细节,仅保留一个直 观的印象也无大碍。本节的几篇推荐阅读中都用不同的方法解答了如何最小化误差,有详 细的推导,因此这里不再赘述。但是我认为如果读者有一些基础的统计知识而且想记住线 性回归推导出的结果,那么结论值得一提,不过跳过也无妨。计算出来的结论是这样的:

首先要计算的是样本中心点,对 b 的导数项为 0 推出最优的直线必然经过样本中心点 (\bar{x},\bar{y}) , 其中

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i, \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i$$

Mean 即均值。

Variance Covariance 看斜率之前先看看 方差 和协方差, 方差6的表达式是

$$\operatorname{Var}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2$$

Sample Variance 6 此注释写给学过数理统计的读者: 此处并非 样本方差 ,样本方差除以的是 n-1

是不是感觉很熟悉?这不就是自变量相对均值的 MSE 吗?而协方差的表达式是

$$Cov(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

它把方差中的平方项换成了 x 和 x 的 交叉项 , 并由此体现出了相关关系。接下来计 算的是斜率 k, 它的表达式是

$$\hat{k} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}$$

虽然分子分母都是求和式,看起来有些复杂,但是总结起来其实就是协方差除以自变 量的方差,即 $k = \text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y})/\text{Var}(\mathbf{x})$,如果把协方差看作一种乘法⁷,那么 $k = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{y})/(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})$ 看起来确实挺像那么回事的。

这样一来,通过点-斜率式方程就可以得到最优的直线,那么直线拟合就告一段落了。

推荐阅读

- 如果你想了解"回归"与"最小二乘"的含义: 用人话讲明白线性回归Linear Regression - 化简可得的文章 - 知乎 https://zhuanlan.zhihu.com/p/72513104
- 如果你想阅读从求导法到线性代数方法的详尽公式推理: 非常详细的线性回归原理讲解 - 小白Horace的文章 - 知乎 https://zhuanlan.zhihu.com/p/488128941
- 如果你想详细了解了线性回归中的术语、求解过程与几何诠释: 机器学习— 算法笔记-线性回归 (Linear Regression) - iamwhatiwant的文章 - 知

https://zhuanlan.zhihu.com/p/139445419

⁷此注释写给熟悉线性代数的同学: 在 向量空间内积 的意义上这几乎正确

1.2 多项式拟合

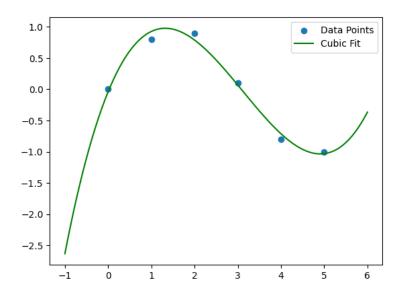


图 3: 多项式拟合示意图 (图为 3 次拟合)

图源: GeeksforGeeks

线性拟合虽然很好,但是如果拿到了明显不线性的一堆数据,那么线性拟合就显得有 Polynomial Fitting 些力不从心了。不过既然都是拟合,能做一次的那按理来讲也能做多次。 多项式拟合 就是这样一种思路,只是预测 \hat{y} 从 kx+b 变成了 $a_0+a_1x+\cdots+a_mx^m$ 8,其中 m 是多项式的次数。而均方误差的表达式甚至几乎不用变,仍然是

MSE =
$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y})^2$$

只不过展开后是一系列的多项式项,待拟合的参数从两个变成了 m+1 个。但是如果观察一下,这个式子仍然是一个(多变量的)二次函数,所以最小化的方法也是一样的。多项式自有多项式的好,能加的项多了,拟合的灵活性也就大了,误差显然会更小。然 Analytical Solution 有一样的,它虽然有一解析解一,但不再像线性拟合一样可以逐项明确说出意义,而是只剩下一堆矩阵运算把这些参数算出来。因此相比于记下公式,形成一个整体上的印象显得尤为重要。

上一小节中,我们从图像看到了这种拟合的几何解释,而多项式拟合也是相似的,还是从 \mathbf{r} 的表达式入手

$$\mathbf{r} = \mathbf{y} - (a_0 \mathbf{x}^0 + a_1 \mathbf{x}^1 + \dots + a_m \mathbf{x}^m)$$

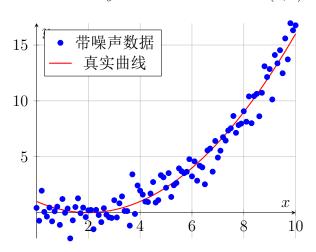
⁸记号说明:虽然习惯上幂次从大到小排列,但是为了下标和幂次的统一性,所以这里选择从常数项到最高次项排列

对比之前的表达式,当 a_0, a_1, \ldots, a_m 变化时,预测得到的结果 $\hat{\mathbf{y}} = a_0 \mathbf{x}^0 + a_1 \mathbf{x}^1 + \cdots + a_m \mathbf{x}^m$ 也会在一个 m+1 维的空间中变化,正如之前的平面,这个空间也是一个 m+1 维的子空间。求最小模的 \mathbf{r} 又回到了从点到子空间的垂线问题。虽然不得不承认:想象从一个高维的 n 维空间中向 m+1 维的子空间做垂线确实有些困难,但是这多少离我们的几何直觉更近了一些。

系数的意义不那么明确了,但是误差下来了,这是好事吗?也不一定,灵活性的另一 Overfitting 面是潜在的**过拟合**。前文中做线性拟合的时候有一个重要的假设是测量得到数据带有一 定的误差。拟合的直线滤去了大部分的误差,留下了重要的趋势。但是如果灵活性太高, 拟合的多项式会过于贴合数据,甚至把误差也拟合进去了。即使在给定的数据上做到了很 小的误差,预测新数据的能力却可能会大打折扣。

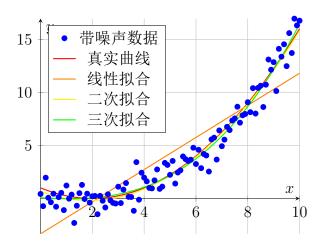
拿做题打个比方:使用直线拟合明显不线性的数据是方法错了,只能说是没完全学会。但是用接近数据量的参数来拟合数据,留给它的空间都够把结果"背下来"了,捕捉到了数据的细节,却忽略了数据背后的规律,化成了一种只知道背答案的自我感动。在几道例题上能做到滴水不漏,但是一遇到新题就束手无策。

举个例子,在下面这个数据集上试图拟合,我们在二次函数 $y = 0.25x^2 - x + 1$ 上添加了标准正态分布的噪声,即实际上 $y = 0.25x^2 - x + 1 + \mathcal{N}(0,1)$ 。

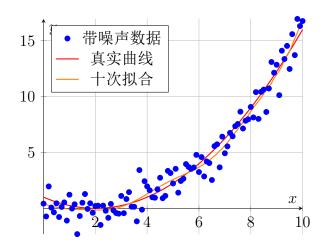


那么现在我们来试试用不同次数的多项式拟合这个数据集。不难看出线性拟合的线与数据点还是相差不少,因为它没能提供可以制造数据"弯曲"形状的项,2次曲线的效果几乎和真实曲线一样,即使提升到3次也没有太明显的改变。

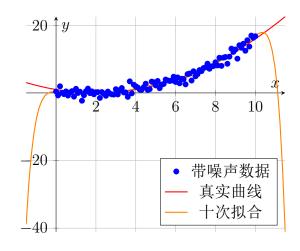
 $^{{}^9\}mathcal{N}(0,1)$:表示一个服从标准正态分布的变量,均值为0,方差为1



但是如果继续增加次数呢? 先来看看十次的拟合效果。



你可能会想,虽然是稍微歪了一点,不过这看起来还行吧。但是如果你把 x 的范围稍微扩大一点,你就会发现势头完全不对了。



一旦离开了拟合的区域,十次拟合的曲线就直勾勾地弯向无穷远,这是因为它把噪声

Generalization

也拟合进去了,从而给出了 泛化性 ¹⁰极差的结果。这就是过拟合的危害。因为参数量与 样本点数量并没有非常显著的差别(10 个参数,100 个样本点),所以从去噪声的角度看, 结果过拟合并不奇怪——过滤掉噪声需要更多的数据。

当然解决办法并不是没有,要解决问题先要找到问题的根源。既然得到的函数行为不符合预期,那么很自然地我们会想问,这个函数的系数怎么样呢?在上面这个具体的例子中,函数的表达式是

 $\hat{y} = -0.000004129005667x^{10} + 0.000200033877258x^9 - 0.004061827595427x^8$

 $+0.044810202155712x^7 - 0.291097682876070x^6 + 1.129425113256322x^5$

 $-2.542208192992861x^4 + 3.091776048493755x^3 - 1.584353162512058x^2$

-0.267618886184698x + 0.362912675589959

简单估算一下就会发现,例如 3, 4 次项的系数都在个位数级别,再乘以 x 的 3 次方、4 次方数值就会变得很大。10 次方项的系数看起来只有 4.1×10^{-6} ,但是乘上 \mathbf{x} 中最大值的 10 次方,也就是 10^{10} 后,这个数值同样会飙升到上万的级别。一堆上万级别的数加在一起,倒不如说项着舍入误差¹¹还能够回归到原来的数据集上已经是奇迹了。也就只有MSE 可以限制一下它在数据集内的行为,出了预定义的范围,这个高次函数大概就放飞自我了。

不过如果一定要用高次函数,补救的办法也不是没有。既然这些系数导致了很大的数 Regularization 值,那限制一下这些数值就好了,这就是 **正则化** 的思路。我们在待优化的函数上加上一个 惩罚项 ,同样地使用平方求和的形式,只不过这次是对系数进行惩罚,为了让系数 尽量小,即尽量贴近于 0,自然想到把它们的平方也加起来(再乘以一个权重),优化的目标¹²变成了

$$Loss = MSE + \lambda \sum_{i=1}^{10} a_i^2$$

可调参数 λ 表明我们希望在多大程度上抑制系数。然而仍然有一个致命的问题:不同系数对最终结果的影响不同。例如在 x=10 这一点上, x^{10} 项的系数对结果的影响远远大于 x 项的系数,即使是 4.1×10^{-6} 这样微小的 10 次项系数也会导致非常大的数值。平方

¹⁰泛化性: 预测原有数据集以外点的能力

¹¹舍入误差:就像手动计算时保留几位小数一样,计算机计算的并不是"实数",而是具有一定精度的浮点数,同样也有误差。例如对于 32-bit 的浮点数,只能精确到 7 个十进制位,这意味着从万位向后数到第 7 位,从百分位就可能已经不准确,在此之后的数位就不太可靠了。

¹²Loss: 损失,与前文单纯使用 MSE 时相同,我们希望让它尽可能小,它的每一项包含了我们对拟合结果的一个美好"祝愿", MSE 项希望它误差减小,正则化项希望它系数正常。

后这一系数变得十分微小,原本用于约束系数大小的正则化项对它的影响更是微乎其微。 那么怎么办呢?

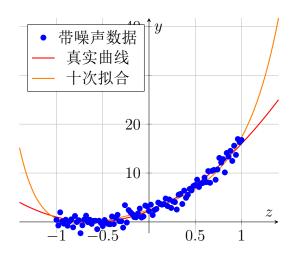
再仔细想想问题在哪里,我们发现一路下来导致问题的根源都是x的高次项即使在系数很小时也会导致数值爆炸。但是如果把x放到[-1,1]的闭区间内呢?这样即使是 x^{10} 项,x的 10次方也不会超过 1,系数再怎么大,至少在小范围内也不会导致数值爆炸,这样一来正则化项才能发挥其约束作用。

操作上只需要把 [0,10] 范围内的 x 线性地映射到 [-1,1] 范围内。这很简单,令 z=0.2x-1 再对 y 用 z 的多项式拟合,这种操作称作 归一化 13 。

事实上只需要一个很小的 λ 就可以在一定程度上抑制高次项的系数,这里我们取 $\lambda = 0.01$,优化的目标变为了

Loss = MSE +
$$0.01 \sum_{i=1}^{10} a_i^2$$

这时拟合出来的图像是这样的:



虽然图中拟合曲线与真值在数据集外确实仍然有显著的差距,但经过自变量归一化和参数正则化项的加入,拟合的曲线至少把数据的大体趋势成功地延伸到了数据集的一个邻域内,不至于像原本的那样惨不忍睹。

不过在实际应用中,几乎不会用到 5 次以上的多项式拟合。仍然是因为容易过拟合:就以 [-1,1] 上的函数为例, x^5 与 x^7 的图像几乎是一样的,它们最大的差值仅为 0.12,这意味着如果允许的高次项太多,一点点微小的噪声就能让轻易地把五次项的系数"分给"七次项,或者反之。这导致拟合的数值稳定性很差,因此显然不太可靠。从这种影响的角 Singularity 度看,高次多项式拟合本身就有 奇异性,解并不稳定(这种对微小噪声敏感的问题常称

¹³归一化:调整数据到某个给定的范围内,使数据在不同场景下更加可比、更加数值稳定。前文计算误差时取平均实际上也是一种归一化。

Ill-posed Problem

为 病态问题)。因此比正则化或者归一化更重要的是,我们应该意识到高次函数并不是万能的。当你觉得需要用到很高次的函数才能成功拟合时,不如先想想,多项式的假设真的合适吗?

我们注意到一个重要的事实:虽然拟合的参数在变化,但是拟合前仍然需要人为地设定多项式的次数,正则项(如果有的话)权重也需要人为设定。这些先验的¹⁴参数通常称为 **超参数** 。如何用模型拟合固然是重要的问题,但是模型的结构,包括如何选取适当的超参数也有学问。因为它们通常不是直接从数据中学习的,而需要人为设定。 <u>有道是Underfitting</u> "学而不思则 欠拟合 ,思而不学则过拟合",我们只有在一定程度上了解问题的本质才能做出适当的选择。

推荐阅读

- 如果你想看更多关于多项式拟合的实战,可以阅读: 多项式拟合的介绍与例子-姓甚名谁的文章-知乎 https://zhuanlan.zhihu.com/p/366870301
- 如果你曾经想过拿问卷调查来做拟合,可以看看: 理科生觉得哪些知识不知道是文科生的遗憾? - 一只小猫咪的回答 - 知乎 https://www.zhihu.com/question/270455074/answer/2374983755
- 这个比喻很好,同一问题下的其它回答也很有趣: 人的大脑会不会出现"过拟合"病?-莲梅莉usamimeri的回答-知乎 https://www.zhihu.com/question/625846838/answer/3250463511

¹⁴先验: 在观测到数据之前, 我们已经了解了一些数据特征。

1.3 高维的线性拟合

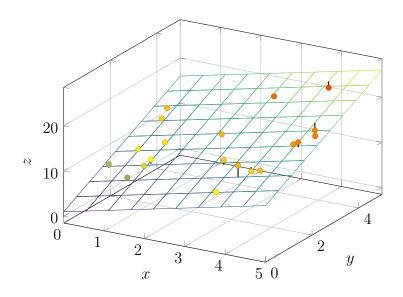


图 4: 高维线性拟合示例

第一节我们介绍了"简单线性回归",即只有一个自变量的线性回归。但是在实际问题中,自变量往往不止一个,这时一元的线性回归就需要改成 多元线性回归 。不过按照我的习惯,文中仍然称为"拟合"。

现实世界中的数据往往是多维的,就以估计体重为例,不难发现年龄和身高就是两个可能相关的变量。如果我们想用一个模型来描述这种相关性的话,最简单的就是线性模型了,与之前的 $\hat{y} = kx + b$ 类似,自然想到用这样的函数 ¹⁵去拟合数据:

$$\hat{y} = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d + b$$

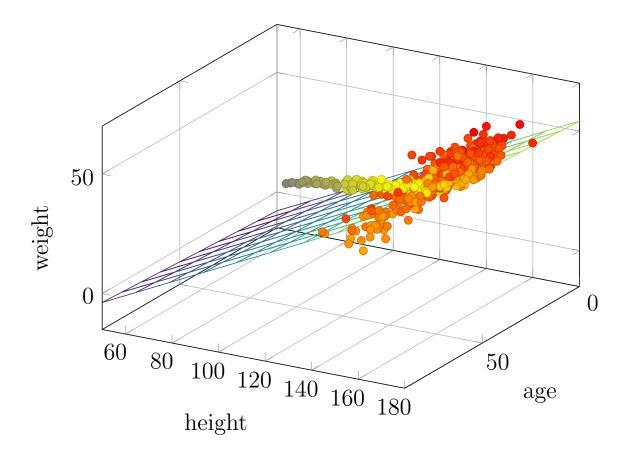
同样地,优化的目标仍然是最小化均方误差,即对 n 个数据点令

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

通过最小化误差得到 $w = [w_1, w_2, \cdots, w_d]$ 和 b 的值。这个过程与一元线性回归的过程是类似的,只不过自变量是一维时,可以在平面上直接画出拟合的直线,二维时可以在空间中画出平面,但是当维数增加到三维及以上时,拟合所用的线性函数就变为超平面了,我们无法直观地看到这个超平面,但是可以猜测,它的原理差不多。

话不多说,先看看效果。这里以美国人类学家 Richard McElreath 搜集到的一个年龄、身高与体重 数据集为例,它的分布与拟合出来的平面是这样的:

weight bias dimension 15 记号说明:这里使用字母 w 表示权重,b 表示偏置,即常数项,d 表示的是空间的 维度 。



通过拟合,我们可以得到一个超平面,它大致描述了数据的分布。这个超平面的方程是 0.04676645038926784·age+0.47766688346191755·height-31.805656676953056 = weight,它比单纯使用身高或者年龄的拟合效果都要好一些。由此还可以量化地看到,年龄与身高都会影响体重,但是年龄是弱相关,而身高是强相关,这也符合我们的日常经验。

不过正如我们之前一直在做的一样,让我们看看更为直观的几何视角。仍然用 \mathbf{x}^0 表示全 1 的向量,使用 $\mathbf{x}_{:1}$ 表示所有样本的第一个特征 (分量), $\mathbf{x}_{:2}$ 表示所有样本的第二个特征,以此类推 16 。那么多元线性拟合时的残差向量变为了 17

$$\mathbf{r} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - (b\mathbf{x}^0 + w_1\mathbf{x}_{:1} + w_2\mathbf{x}_{:2} + \dots + w_d\mathbf{x}_{:d})$$

如果回顾一下我们在多项式拟合一节的内容,就会发现这和多项式时的残差向量

$$\mathbf{r} = \mathbf{y} - (a_0 \mathbf{x}^0 + a_1 \mathbf{x}^1 + a_2 \mathbf{x}^2 + \dots + a_m \mathbf{x}^m)$$

有着惊人的相似之处。细心的读者可能已经发现,如果令这些分量 $\mathbf{x}_{:1}, \mathbf{x}_{:2}, \dots, \mathbf{x}_{:n}$ 分别为 \mathbf{x} 的幂次组成的向量 $\mathbf{x}^{1}, \mathbf{x}^{2}, \dots, \mathbf{x}^{d}$,那么我们得到的完完全全就是多项式拟合。这也就意味着,多项式拟合实际上可以视为多元线性拟合的一种特殊情况。

 $^{^{16}}$ 记号说明: 冒号表示取所有行,这是为了与 Python 中 Numpy, Torch 等库的列切片语法 a[:,j] 对齐。

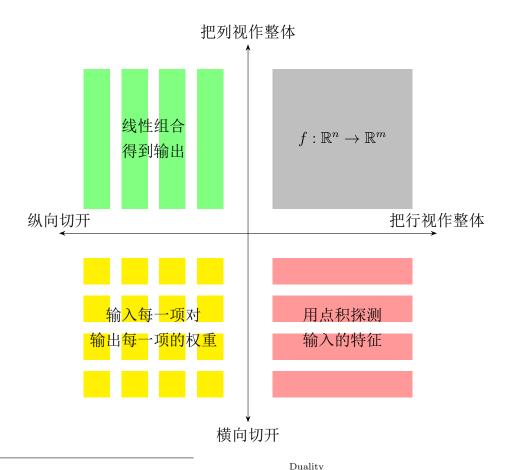
¹⁷记号说明:在公式中我特意将常数项放到了最前面,这是为了让它和多项式拟合的形式保持一致。

事已至此,我们似乎已经许多次遇到了这样一种情况:从一面看过去,是代数上,一组样本点上的线性拟合。但是从另一面看过去,确是在几何上找到高维空间的超平面中最接近给定点的向量。这里其实有不少精妙的数学原理¹⁸,但是考虑到这里的主题是机器学习,我将只带读者简要地复习(或者学习)一下线性代数,更为系统性地从几种略有差距的视角¹⁹体会矩阵的本质。

在绘图讲解前,我首先要感谢 <u>《线性代数的艺术》</u>(The Art of Linear Algebra) 这篇笔记,我第一次读到便感到文中的插图绘制非常精妙。它的思路是顺着 Gilbert Strang 教授书籍 <u>《写给所有人的线性代数》</u>(Linear Algebra for Everyone) 来的,我认为可以看成是一本矩阵图鉴,对理解矩阵运算有着极大的帮助。

<u>3Blue1Brown</u> 的线性代数系列 也是优质线性代数学习资源。这个制作精良的合集仅用不到两个小时的视频就清晰地从几何的角度讲明白了线性代数的基础知识,也是我入门线性代数的第一课。
Interpretation

矩阵有很多种 解读 ,不过我觉得大致可以按照是否把行看作一个整体以及是否 把列看作一个整体来分为四类。



¹⁸写给数学基础好的读者:这本质上体现了代数与几何的对偶性。

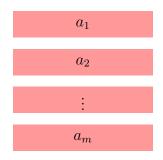
Overall Row-wise Column-wise Element-wise 19 几种视角:整体解读、按行解读、按列解读、按元素解读。

矩阵究竟是什么,我们的大学教了很多年,也没有完全搞清楚。从数学的角度看,可 Map 能 Linear Algebra Done Right 的思路比较好,搞了个向量空间起手,全程以映射的逻辑贯穿。但是在国内,大部分教材一上来前两章就是讲行列式的计算,教学内容逐渐搞僵化了。

既然是服务于机器学习,许多内容²⁰我们一概砍掉,只留下最为基础的内容。第一种视角就是作为 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 的线性映射。使用矩阵的第一个重要目的就是把一个线性映射"打包"成一个符号,毕竟只有这样才能方便地书写、推导和计算。从工科的视角看来,一个"向量"无非是一个数组,而一个"线性映射"实际上就是吃进去一个数组,吐出来另一个数组的机器²¹。矩阵作为一个二维数组,忠实地记录了这个机器的所有参数。它的运算规则是这样的:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{bmatrix}$$

从输出的表达式中,我们自然引出了行的视角。如果把矩阵看作若干行:



我们会发现输出 y 的每一个分量 y_i 都是输入 x 与行 a_i 的点积²²。例如

$$y_1 = a_1 \cdot x = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n$$

Homogeneous weighted Sum 诚然,每一行都是一个 齐次的 23 线性函数,它的形式也只能是这种 x 的 加权和 ,但是相信一定会有读者好奇:点积衡量了两个向量的相似程度,那么这里做点积的几何意义是什么呢?答曰:探测输入的特征。

Change of Basis Eigen Decomposition Quadratic Form ²⁰许多内容: 线性方程组的求解、行列式、 基变换 、 特征分解 、 二次型 。

Function 21此注释写给编程基础较好的同学:这里的机器指的就是编程中的 函数 。

 $^{^{22}}$ 严格地说 a 是行向量,x 是列向量,这中间在数学上有一些差别,是矩阵乘法而不是点积。但是在计算机存储中,因为都是一维数组,从实用的角度并不需要纠结于此,这种 记号混用 就见怪不怪了。

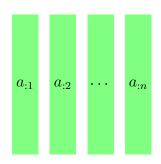
²³齐次: 指不带偏置(常数)项。

Feature Detector

我们可以把矩阵的每一行看作一个特征检测器,它的方向表明了待检测的特征方向,Feature Response 与 x 的点积则说明了这个输入在这个特征上的响应强度(通常称为 特征响应)。当 x 与特征的方向相近时响应的值为正,而当 x 与特征的方向相反时响应的值会为负,当 x 与特征几乎无关时响应的值会接近于零。这是点积的几何特性,至少从理论上为特征提取画出了一条路径。

这时如果考虑怎么样的输入可以接近预期的输出呢?根据几何解释,其实就是试图找到一个输入向量,让它尽可能通过这些特征检测器,使得每一个特征检测器的响应值与预期的响应(输出的对应分量)尽可能接近,并考虑使用均方误差来"惩罚"不接近的程度,我们一开始的代数解释便是如此。

但是如果改改输出的写法,把矩阵切成若干列,我们又有了一个不同的视角,不过这里我们用 a_{ij} 表示它的列:



这样看来,矩阵的乘法也可以写成

$$Ax = \begin{bmatrix} a_{:1} & a_{:2} & \cdots & a_{:n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

 $= x_1a_{:1} + x_2a_{:2} + \cdots + x_na_{:n}$

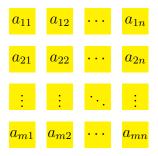
也就是说,输出写成了输入的线性组合。这时我们在输出的空间 \mathbb{R}^{m} 操作,而输入的空间 \mathbb{R}^{n} 仅仅是作为权重的载体,给出了这些列向量应该以怎么样的比例组合。

这时我们要怎么考虑用输出反推合适的输入这个问题呢?随着输入的变化,输出会变为列向量的不同组合方式,正如之前所说的,我们需要在这些列向量线性组合形成的超平面上找点,让它和预期的输出尽可能接近,这就是我们在前文提到的最小二乘的几何视角。

Distruction

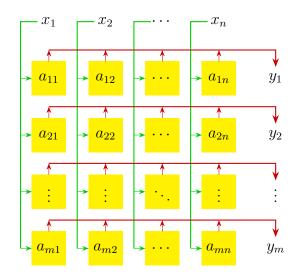
最后一种角度则带有更为浓重的 解构 24 色彩,如果把矩阵看成一个数表,作为一个填了数字的 $m \times n$ 矩形:

²⁴解构: 哲学术语,通常指的是对一个结构或概念进行拆解、分析。



一般来说,我们的教材都是这么引入的,但是就像我刚才提到的一样,这种理解有着一股解构的色彩。如果没有解构后重新的 建构 25 ,这种理解很容易让人迷失在行列式、特征值、特征向量等等复杂计算的汪洋大海中,从而忘记了矩阵的本质。那么这种解释有什么意义呢?我认为它的作用就在于 a_{ij} 体现了第 j 个输入对第 i 个输出的权重。

让我们看看下面这个示意图:



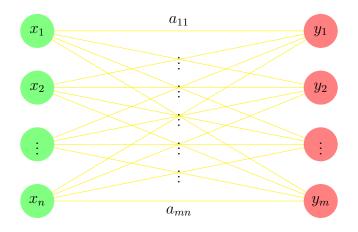
矩阵乘法可以看成这样,输入的每个分量沿着列地址线²⁶输入到每一列的所有块,由每个元素乘上对应的权重后,将结果"上传"到对应的行地址线上,最后在行地址线上的所有块累积起来得到输出的每个分量。

这个图还有另外一个很常见的呈现形式,把它看成一个无偏置的线性层²⁷,我们通常是这样绘制的:

²⁵建构: 哲学术语,通常指的是对一个结构或概念进行重建、整合。

²⁶地址线: 计算机内存中的概念,虽然逻辑上内存是连续的,但是实际上内存寻址时有很多层,最底层时 Row/Column Address Strobe 被选择的内存芯片是通过行和列寻址的,物理上由两条地址线输入 行/列地址选通信号。

 $^{^{27}}$ 线性层: 在后面章节的机器学习中会成为一个基本模块,本质上就是从输入 x 得到输出 y=Ax+b 的过程,这里的无偏置即 b=0。



每条从 x 到 y 的连线都代表有一个从 x 到 y 的权重,我们给 x_j 到 y_i 的连线赋予权 重 a_{ij} ,它就表明了输入 x_j 是如何影响输出 y_i 的。

至此我们已经从四个有差别但是又有联系的视角理解了矩阵的行为,不过我觉得我对于不同的解释还有一点观察。当降维时,特征提取(行的视角)体现的更明显,而当升维时,特征组合(列的视角)更为重要。降维伴随着对信息的压缩和精简,通过去掉不重要的部分,更接近事物的本质。升维不仅仅是增加维度,更是通过新的空间来赋予数据提供更多的可变性。在这个过程中,每一列代表了一个基向量,整个矩阵的列向量按比例组合出高维的结果。

花了一些篇幅来复习线性代数,是时候回到多元线性拟合的问题上了。不过这次可以使用矩阵的语言来描述这个问题了。假设我们有 n 组 d 维的 x 的取值,它们组成了一个 $n \times d$ 的矩阵 \mathbf{x}^{28} 。我们的目标是找到一个 d 维的 w,使得数据集上 $x \cdot w$ 尽可能接近 y,现在 \hat{y} 的表达式用点积的语言可以简洁地写为 $\hat{y} = x \cdot w + b$ 这种形式。

但是通过一点点技巧可以让问题更简洁,在拟合函数中,我们可以把 b 合并到 w 中,也就是

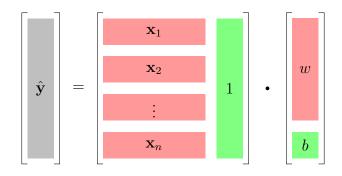
$$\hat{y} = x \cdot w + b$$

$$= x_1 w_1 + x_2 w_2 + \dots + x_d w_d + b$$

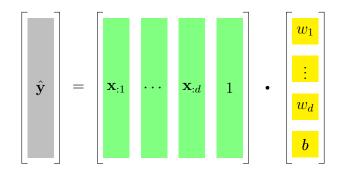
$$= \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_d & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \\ b \end{bmatrix}$$

 $^{^{28}}$ 记号说明:使用大写字母表示矩阵的比较多,但是这里为了美观和符号的一致性,我们仍然采用黑体小写字母表示所有数据点的集合。 \mathbf{x}_i 表示第 i 个数据点, $\mathbf{x}_{:j}$ 表示所有数据点的第 j 个分量, x_{ij} 表示第 i 个数据点的第 j 个分量,因为是标量,所以采取小写。而在方程 $x \cdot w$ 中,x, w 并非数据点的集合,而是变量,故虽然为向量,但是采用斜体。

对于样本,把所有的行并起来就变成了不需要额外添加偏置的 $\hat{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{x}}\tilde{w}$ 。如果要说这个 $\hat{\mathbf{x}}$ 是什么,它就是把 \mathbf{x} 的每一行拼上一个 1:



但是如果改成用列的视角来看待矩阵 $\tilde{\mathbf{x}}$,我们会发现问题变成了用 $\mathbf{x}_{:1},\mathbf{x}_{:2},\cdots,\mathbf{x}_{:d}$ 与 \mathbf{x}^0 的线性组合来贴近 \mathbf{v} 。



诶? 这不是函数拟合问题吗? 如果把 \mathbf{y} 和 $\mathbf{x}_{:j}$ 看作是关于 i 的函数(这里函数定义在 $\{1,2,\cdots,n\}$ 上,换言之,记 $\mathbf{y}(1)=y_1,\mathbf{y}(2)=y_2,\cdots,\mathbf{y}(n)=y_n$,同理,设 $\mathbf{x}_{:j}(i)=x_{ij}$ 。 那么我们的问题就是用 d 个函数 $\mathbf{x}_{:1}(i)\sim\mathbf{x}_{:d}(i)$ 与一个常值函数 $\mathbf{x}^0(i)\equiv 1$ 来拟合一个给定的函数 $\mathbf{y}(i)$ 。

去掉常数项(或者把常数项也当成一个 $\mathbf{x}_{:d+1}$)并把自变量 i 当成一元函数拟合问题中的 x 就可以发现: 这与使用给定函数 $f_1(x) \sim f_d(x)$ 的线性组合,在若干数据点上拟合给定函数 f(x) 这一问题没有任何差别。由此可见,用给定的函数集来拟合一个函数本质上与多元线性拟合有着完全相同的数学结构。

至此,我们至少已经初步理解了线性拟合。在这一章的最后,让我们做个总结。

- 最开始我们引入了一元的线性拟合,学会了最小二乘法与最小化损失以优化参数的 基本思想,也学会了如何给数据加权。
- 接下来来到了多项式拟合,虽然是曲线,但是如果把x的方幂看作线性独立的分量,这仍然可以看作是一种线性拟合,在这里我们领略到了过拟合的危害,也理解了为什么要使用正则化与归一化方法。

- 在过拟合中,我们得到的更重要的启示是要意识到高次并不意味着万能,合适的才 是最好。如果参数足以存下所有的数据,那么大概率就会过拟合。
- 最后我们引入了多元线性拟合,通过矩阵的不同解读,我们理解了特征提取与特征 重组的逻辑。
- 从矩阵的行、列解读中,我们意识到多元线性拟合与函数的线性拟合本质上是一样的,这里有一种精妙的对应关系。

推荐阅读

• The Art of Linear Algebra 这篇文章非常好,但是如果你上不去 GitHub,进这个知乎回答看也行:

如何快速理解线性代数? - J小奇迹 | 的回答 - 知乎 https://www.zhihu.com/question/30726396/answer/3124578647

• 这篇文章推荐给数理统计与线性代数都学的较好的读者: 回归分析—笔记整理(6)——多元线性回归(上)-学弱猹的文章-知乎 https://zhuanlan.zhihu.com/p/48541799

2 逻辑亦数据

2.1 逻辑门

这一章将视角从拟合上短暂地移开,我相信理解逻辑和数据的关系多少也会帮助我们理解神经网络。读者或许好奇过,计算是如何完成的呢?在讨论这个问题之前,先来做一个约定,我们将 0 视作 假 , 1 视作 真 ²⁹ 。先来看看几种最简单的逻辑运算。

No

1. 非 (数学写法: ¬, C 语言写法: !, Python 写法: not)

非是一元运算符,它只有一个输入,输出与输入相反,其中

$$\neg 0 = 1, \neg 1 = 0$$

也就是说 $\neg x = 1 - x$, x = 1 - x, x = 1 -

And

2. 与 (数学写法: A, C 语言写法: &&, Python 写法: and)

与是二元运算符,它有两个输入,仅当两输入都为 1 时输出为 1,否则输出为 0,从真值表³⁰就可以看出这一点:

\boldsymbol{x}	y	$x \wedge y$
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

这与乘法的结果是一样的,所以有时也会省去和的符号,使用 xy 表示 $x \wedge y$ 。

Or

3. 或(数学写法: V, C语言写法: ||, Python 写法: or)

或是二元运算符,它有两个输入,仅当两输入都为 0 时输出为 0,否则输出为 1,真值表如下:

$$\begin{array}{cccc}
x & y & x \lor y \\
0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 1 \\
1 & 0 & 1 \\
1 & 1 & 1
\end{array}$$

H

²⁹逻辑0/1: 在物理上,逻辑 0 由低电平表示,逻辑 1 由高电平表示,TTL 和 CMOS 电路各有多种电压标准,感兴趣的读者可以自行学习电路的知识。

³⁰ 真值表:逻辑运算的输出与输入的关系表。

在图上这些运算一般会这样表示:



图 5: 逻辑门: 从左到右分别为非门、与门、或门

看起来这只是一些非常简单的运算,但是基本上有这些就可以构建出所有的计算³¹。 Exclusive Or 例如 异或 运算表示两个输入中有且仅有一个为真。最粗暴简单的方法是列出它为 1 的 所有情况: $x \text{ xor } y = (x \land \neg y) \lor (\neg x \land y)$ 。这样我们就可以用非、与、或门来构建出一个异或门。

虽然它可以完成"所有的运算",但是具体来说,比如有读者可能要问,如果我想计算加法,它应该怎么办呢?既然逻辑上只有两个值,那么自然地计算机就要使用二进制来表示数字了。二进制的加法非常简单,就以 5+3 为例,我们可以这样计算:

$$\begin{array}{r}
 101 \\
 + 011 \\
\hline
 1000$$

逻辑门又是如何完成这一过程的呢?我们将它拆解成一个个小问题。当加到某一位时,我们需要考虑三个数:两个加数和来自后方的进位。例如下面这种情况

$$\begin{array}{ccccc} & \dots & 1 & \dots \\ + & \dots_1 & 0_1 & \dots \\ \hline & \dots & 1 & \dots \end{array}$$

如果考虑这一位相加得到的结果,后面相加得到结果的情况我们已经不关心了(因此标为浅灰色),在这里我们只关心从后方是否有进位(按照列竖式加法习惯,图中蓝色标注的下标 1)。再考虑两个加数的这一位分别为 1 和 0,所以 1+0+1=2,在结果栏写下一个 0(横线下方红色的 0),向前进位 1(写在前面一位下标的红色的 1),然后以同样的流程处理前一位。

记两个加数的这一位分别为 x,y,后方进位为 c,那么这一位的加和 s 和向前进位 c' 可以表示为

$$s = (x \operatorname{xor} y) \operatorname{xor} c$$
$$c' = (x \wedge y) \vee (c \wedge (x \operatorname{xor} y))$$

Turing Completeness

³¹所有的运算: 这里指的是 图灵完备性 ,如果你想深入了解,可以在 Steam 上购买一个叫做 Turing Complete 的硬核游戏,推荐游玩。

当然这并不是唯一正确的写法,实际上有很多正确的写法,证明就免了,如果读者有兴趣可以自行尝试,或许也可以找到另外的表达式。最简单粗暴的方法就是把两个加数的情况和是否带进位的情况全部列出来,分成 $2^3 = 8$ 种情况,就得到了如下的表,并逐一验证:

加数1 <i>x</i>	加数 2	后方进位 c	加和 sum	向前进位 c^\prime	结果位 <i>S</i>
0	0	0	0	0	0
0	0	1	1	0	1
0	1	0	1	0	1
0	1	1	2	1	0
1	0	0	1	0	1
1	0	1	2	1	0
1	1	0	2	1	0
1	1	1	3	1	1

就像等式描述的一样,每一个输出的位都可以通过输入的逻辑运算用一定的电路连接表示,把多个电路串起来³²,就可以完成加法了。本质上我们的计算机 CPU 就是由这样的门电路与接线组成的³³。一个 CPU 需要大量门电路组合形成,现代的 CPU 包含数十亿个门电路,而一个门又由若干个微型的晶体管构成。为了让电路精确地实现我们预期的功能,需要精准地将电路雕刻在硅片上,这就是光刻技术如此重要的原因。但是山在那,总有人会去登的³⁴,两个多世纪的技术积累才造就了现代计算机的诞生,从逻辑门到通用计算机每一步的发展都凝聚着人类技术与智慧的结晶。

³² 串起来:对于加法这个例子,在网上搜索全加器就可以很容易地搜到。

³³说明:实际上制造中,与非门、或非门使用更多,因为它们有更方便制造、体积较小、功耗低等优势。

³⁴山在那,总有人会去登:语出源自英国登山家 George Mallory 当被问及为何要攀登珠穆朗玛峰时的回答"因为山在那里"。刘慈欣的短篇小说 <u>《山》</u>引用了这句话。写到大量的微晶体管以精妙地排布构成电路让我想起小说中从基本电路开始进化的的硅基生物,如果你看到这里看累了,去看看小说放松一下吧。

2.2 程序是怎么执行起来的

擅长编程的读者或许对编程-编译-执行的路径再熟悉不过了,可少有人思考其中细节。理解程序是如何运行起来的其实是一个基础性的问题,但如果深究下去,这里的水很深:仅是从代码编写到程序运行的过程这一个问题,就足以写好几本书³⁵了。因此我仅仅会从一个极简的视角来介绍 CPU 运行程序的流程,顺带解释必要的概念。让计算机执行程序前,我们首先需要思考"我们想让计算机做什么"并能把它讲明白。开发的第一步永远是明确需求,而后才是写代码让计算机执行,这一点贯彻到后续的机器学习也是一样的。

CPU 不是人类,它并不天然地理解我们的语言,不过或许并不应就这一点给我们带来的不便而感到沮丧:因为从人类手动完成一切计算到计算机的出现,电子器件的计算能力已经将人类从许多重复、繁琐的工作中解放出来。CPU 现在不能干的很多,但此刻更应该思考的是,它能干什么呢?这里我顺着这份CSAPP视频合集的思路简单介绍一下。Architecture Instruction Set

现代的 CPU 通常包含复杂的 架构 与 指令集 ,但是为了便于理解,我们先只考虑一个极度简化的 CPU,它就像是在一张"草稿纸"³⁶上遵照着一份"指南"³⁷运算。能干的事情也就是下面这几个指令(这里与主要的几种汇编语法都略有区别):

```
mov a, b ; 将 b 的值赋给 a add a, b ; 将 a 和 b 相加, 结果存入 a sub a, b ; 将 a 減去 b, 结果存入 a mul a, b ; 将 a 乘以 b, 结果存入 a div a, b ; 将 a 除以 b, 保留整数部分, 结果存入 a jmp addr ; 跳转到 addr 执行 je addr ; 如果上一次运算结果为 0, 则跳转到 addr 执行 jne addr ; 如果上一次运算结果不为 0, 则跳转到 addr 执行 jl addr ; 如果上一次运算结果小于 0, 则跳转到 addr 执行 cmp a, b ; 比较 a 和 b 的值,设置标志位
```

先解释一下这些指令名称的含义:

35好几本书: 比如几本经典教材

- 程序如何编译出来: 《编译原理》(Compilers: Principles, Techniques, and Tools)
- 计算机的结构: 《深入理解计算机系统》(Computer Systems: A Programmer's Perspective)
- 程序的结构: 《计算机程序的构造和解释》(Structure and Interpretation of Computer Programs)

³⁶草稿纸: 比喻计算机的内存,暂且把它理解为每格写了一个整数,实际计算机中是字节。

³⁷指南: 比喻计算机的程序,是计算机要执行的 指令 。

- mov: move 的缩写,将一个数值从一个地方移动到另一个地方。
- add, sub, mul, div: add, subtract, multiply, divide 的缩写, 加减乘除。
- jmp, je, jne, jl: jump, jump if equal, jump if not equal, jump if less 的缩写, 分别为跳转、当等于时跳转、当不等于时跳转、当小于时跳转。
- cmp: cmpare 的缩写,比较。

这里写作 a, b 的其实都表示内存上的一个地址,类似于如果给行编号,那么 a, b 就是行号。再引入一个额外的符号,[a] 表示取地址 a 上的值,例如当内存单元 42 中存着值 64 时,[42] 就表示 64,例如 mov 10,[42] 表示的就是把 64 号内存的值赋给 10 号内存。#x 表示 立即数值 x,例如 #10 表示数值 10 本身,而非内存位置 10。那么我们可以写出一个简单的程序,例如把内存 0 位置38的值与内存 1 位置的加和存入内存 2:

```
mov 2, 0 ; 将 0 号内存的值赋给 2 号内存
add 2, 1 ; 将 2 号内存和 1 号内存相加,结果存入 2 号内存
```

又比如,如果我们想交换内存0和内存1位置的数值,可以这样写:

```
mov 2, 0 ; 将 0 号内存的值赋给 2 号内存
mov 0, 1 ; 将 1 号内存的值赋给 0 号内存
mov 1, 2 ; 将 2 号内存的值赋给 1 号内存
```

这个过程运行时³⁹看起来是这样的,右边的列表表示内存,每个元素是内存的一个单元,这里 x_i 示意第 i 个内存单元。x,y 都是数,你可以把它带入 1,2 或者你想的任何数字,右侧的列表则表示对应的指令执行后的内存状态:

指令
$$[x_1, x_2, x_3, \cdots]$$
(initial)
$$[x, y, \neg, \ldots]$$

$$\triangleright \text{mov } 2, 0 \quad [x, y, x, \ldots]$$

$$\triangleright \text{mov } 0, 1 \quad [y, y, x, \ldots]$$

$$\triangleright \text{mov } 1, 2 \quad [y, x, x, \ldots]$$

³⁸内存 0: 按照计算机中的习惯, 计数从 0 开始。

³⁹你先别管它怎么运行起来的。

不过看到这里,不知读者是否发现了一个问题: 内存中的 2 号位置在交换 0 号和 1 号位置的数值时被覆盖了。这种情况一般称为副作用 40,但似乎不太可能既不修改其它内存,又交换数值 41。万一内存 2 储存了重要的数据,丢失了是很大的问题。那么怎么办呢? 干脆设定某块区域可以随意用作临时存储 42,我们就此"发明"了寄存器 43。就假设我们接下来约定了地址 0-7 是寄存器,可以存储临时的数据。为了方便阅读,接下来把它们标记为 r0 到 r7。既然这样,0-7 的位置就可以用作临时存储了,但是同时它们也不适合作为输入输出 44。所以这次我们把任务改为交换内存 8 和内存 9:

```
      mov r0, 8
      ; 将 8 号内存的值赋给 0 号寄存器

      mov 8, 9
      ; 将 9 号内存的值赋给 8 号内存

      mov 9, r0
      ; 将 0 号寄存器的值赋给 9 号内存
```

Volatile

这样程序运行的过程中改变的就仅仅是我们视作数据内容 易失的寄存器,而内存中的数据则保持不变。这样我们再来写一个简单的求和程序,在内存 8 中存储了求和的起点地址,内存 9 中存储了求和的终点地址,为了方便起见,我们使用左闭右开区间,即包含起点,但不包含终点(一会就会看到它带来的方便)。最后将求和结果存入内存 10:

```
mov r0, #0 ; 将 0 写入 0 号寄存器
mov r1, 8 ; 将 8 号内存的值赋给 1 号寄存器
mov r2, 9 ; 将 9 号内存的值赋给 2 号寄存器
loop:
    add r0, [r1] ; 将 1 号寄存器指向的内存的值加到 0 号寄存器
    add r1, #1 ; 1 号储存器指向的内存地址加 1
    cmp r1, r2 ; 比较 1 号寄存器和 2 号寄存器的值
    jne loop ; 如果不相等, 跳转到 loop
mov 10, r0 ; 将 0 号寄存器的值存入 10 号内存
```

⁴⁰副作用:指令运行的过程中对其他地方产生的影响。

⁴¹不太可能: 在本例中确实有 <u>奇技淫巧</u> 可以在不设中间变量的情况下交换变量,只是它使用到了一些代数性质,既不方便,可读性和可拓展性也差。

⁴²临时储存:可以理解为一种草稿纸,内容可以随时丢弃

⁴³寄存器:实际的 CPU 中,寄存器是 CPU 内部的一块存储区域,与内存的处理、读写速度等都有显著的不同。但是出于易于理解起见,我们这里仍把它当作一个特殊的内存区域。

⁴⁴不适合:这里指的是不方便我们的讨论,实际程序中是靠一定的约定依靠寄存器传递参数的,但是这些规则可能会为清晰的说明带来困扰,所以在这里寄存器还是用作纯粹的草稿。

严格来讲上面这段代码包含了前文还没引入标签的概念,其中的 loop: 就是一个标签,它是一个位置的别名⁴⁵,也是填写在 jmp, je, jne 指令后的地址。

这个程序运行起来是怎么样的呢?假设我们在 8 号位置存储了起点地址 15,9 号位置存储了终点地址 18 (它们虽然储存的是地址,从程序逻辑上指向的是内存块,但是本质上在 CPU 看来仍然是一种"整数",只是这个整数记录了另一个整数的位置信息)。那么程序运行的过程大概是这样的(这里假设内存中 x_{15}, x_{16}, x_{17} 分别存储了 1, 2, 3):

指令	$ [r_0,r_1,r_2,\cdots,$	$x_8, x_9, x_{10}, \cdots,$	$x_{15}, x_{16}, x_{17}, \cdots]$
(initial)	[-, -, -, · · · ,	$15, 18, -, \cdots,$	$1,2,3,4,\cdots]$
\triangleright mov r0, #0	$[0, _, _, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$1, 2, 3, 4, \cdots$] 向 r_0 写入 0
⊳ mov r1, 8	$[0,15,_,\cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ 将 $[x_8]$ 的 15 赋给 $[x_1]$
\triangleright mov r2, 9	$[0, 15, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ 将 $[x_9]$ 的 18 赋给 $[x_2]$
\triangleright add r0, [r1]	$[1, 15, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ $r_1=15$, 取 $x_{15}=1$ 加到 r_0
\triangleright add r 1, #1	$[1, 16, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ r_1 加 1 (指向 x_{16})
$\rhd cmp \ r1, r2$	$[1, 16, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$1, 2, 3, 4, \cdots$] \to (16 \neq 18, 跳回 loop)
\triangleright add r0, [r1]	$[3, 16, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ $r_1=16$, 取 $x_{16}=2$ 加到 r_0
\triangleright add r 1, #1	$[3, 17, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ r_1 加 1 (指向 x_{17})
$\rhd cmp \ r1, r2$	$[3, 17, 18, \cdots,$	$15, 18,, \cdots,$	$1, 2, 3, 4, \cdots$] \to (17 \neq 18, 跳回 loop)
\triangleright add r0, [r1]	$[6, 17, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ $r_1=17$, 取 $x_{17}=3$ 加到 r_0
\triangleright add r 1, #1	$[6, 18, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ r_1 加 1 (指向 x_{18})
$\rhd cmp \ r1, \ r2$	$[6, 18, 18, \cdots,$	$15, 18, -, \cdots,$	$1, 2, 3, 4, \cdots] \rightarrow (18 = 18, 顺序执行)$
⊳ mov 10, r0	$[6, 18, 18, \cdots,$	$15, 18, 6, \cdots,$	$[1,2,3,4,\cdots]$ 将 $[r_0]$ 的 6 存入 $[x_{10}]$

我们先从日常生活经验来理解这么一件事情:你在做作业,突然感觉饿了,于是你拿起手机,打开了某外卖软件,点了一份外卖。这个过程中,你并不需要知道外卖是怎么做的,而在点完外卖后,你放下手机,继续做作业。我们从这个例子中可以得到什么启发呢?首先,原本的语境是做作业,点完外卖后应该要切换回做作业的场景,而不是紧接着打开某视频或者小说软件,这说明你需要记住你原本的工作做到哪里了。其次,你的行为是逐层嵌套的,要先拿起手机才能点外卖,但是点完之后要先退出外卖软件,然后才是放

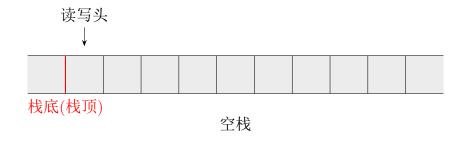
⁴⁵别名: 例如在本例中,它指代 add r0, [r1] 所在的行

下手机。就像这样两个闭合的括号 (()), 你需要先进入外层才能进入内层,反过来要先退出内层才能退出外层。我想这已经足以说明函数应当如何设计了: 总的来说要有一个入口和一个出口,而且函数内部的操作应该是封闭的,用完要能够切换回原来的场景。

跳进函数很容易,只需要 jmp 到函数的入口执行代码就可以了,但是仔细一想,我们的函数调用完之后要怎么知道该回到哪里呢?这里我就要提到一个之前没有明说的地方,Program Counter 实际上执行程序时我写在每一行的指令都是有编号的,这个编号就是 程序计数器 46。与其它的寄存器不同,这个寄存器是有专门用途的,所以称为 专用目的寄存器 ,而其它可以General-Purpose Register 它的寄存器称为 通用目的寄存器 。在前文中指令左侧画的小三角就是程序计数器的表示,所以"记住"运行到了哪里实际上只需要把程序计数器的值存起来,然后在函数结束后再把它取出来就可以了。

最简单的想法是,再设置一个寄存器专门用来存储要返回的地址,不过这个想法存在一个问题:如果在函数里面再次想要调用其它函数,那么这个寄存器就会被覆盖,也就是说内层函数调用成功并返回了,外层函数却不知道该回到哪了。为此我们发现存储应该是分层的,每进入一个函数就应该有一个新的存储空间,当退出时再把这个存储空间销毁,Last In First Out Stack 而且进入和退出的顺序是相反的(这种顺序通常称为 后进先出),这就引出了 栈 。

这里画一幅图来说明栈的概念:想象一张有很多个格子的纸条,我们有一支带橡皮的铅笔(下面画一个小的箭头表示这支"笔"),刚开始栈是空的,里面什么也没有存储。一条边界固定,称作栈底,另一条边界线会变化,称作栈顶,两线重合表明栈是空的。



当我们向其中加入一个元素时,就把这个元素放在栈顶,同时读写头指向下一个位置。这个过程称为压栈,例如上面的空栈加入一个元素后的状态是这样的:



⁴⁶程序计数器:在实际的 CPU 中,程序计数器是一个寄存器,用来存储待执行的指令地址。

再加入一个元素呢?这个元素又会被跟着放在栈顶,读写头的位置加 1,即指向下一个位置,就像这样:



当我们要取出一个元素时,就把栈顶的元素取出,同时读写头向前移动一个单元。这 Pop 个过程称为弹栈,例如上面的栈弹出一个元素后的状态是这样的:



栈就像一摞盘子,每次放盘子都是放在最上面,取盘子也是从最上面取(我们不讨论一次拿走多个盘子的情况)。只需要知道如何往上放和如何取下来就可以操作了。不过盘子能叠的高度是有限的,正如内存是有限的,但是假使我们的程序没有太深层的函数调用,这里就假设是 80 层⁴⁷,那么我们只需要分配 80 个单位的连续内存空间。对于人类来讲,匹配十几层的括号已经不可思议,80 层更是相当深了⁴⁸。除此之外我们需要一个寄存Stack Pointer器来存储栈顶的位置,其称为 栈指针 。于是我们大手一挥,把 8 号位置作为栈顶指针,用一个别名 sp 代表它。又把 20 到 99 号内存分配给栈。如果暂且不考虑调用层数太深的问题。加下来函数调用要怎么样呢?

首当其冲的是把当前的下一条指令地址压到栈顶,接下来是把栈顶指针加 1,然后再jmp 到函数的入口49。在函数结束时,我们需要先恢复栈顶指针,再把栈顶我们事先存的

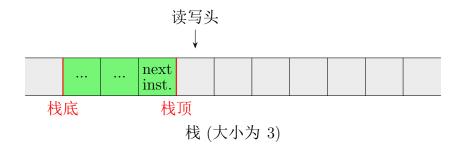
⁴⁷80: 这个数字有其历史原因,早期计算机终端通常只有 80 列,因此 80 个字符以内成为了 Linux 编码的规范,这个规范延续到了很多语言的编程风格建议之中,成为一种约定俗成。这里限制深度 80 意味着如果使用"标准"的列宽,一行能写下所有的左括号。

Callback 48相当深:相对大部分应用程序确实是这样的,但是对于一些特殊的部分,例如搜索、嵌套 回调 、Ray Tracing 光路追踪等,完全可能达到成百上千层。

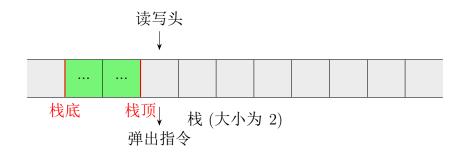
 $^{^{49}}$ jmp:本质上读者可能已经发现了,jmp 实际上就是把某个值写入程序寄存器,这样一来 CPU 就会跳转到这个地址执行了。

下一条地址弹出来,最后再 jmp 到这个地址。

看起来大概像这样,初始时栈中可能已经有了一些内容,我们把下一条指令的地址写 入栈,栈顶右移。



等函数执行完要返回到原先的位置时,我们先把栈顶指针左移,再把栈顶的下一条指令地址取出来,最后 jmp 到这个地址。



另外,在前面的例子中,起始、终止地址、写入位置等参数是通过手动指定的 8,9,10 位置来传递的,但是我们显然不想为每一个函数都手动指定参数要放在哪里,这很麻烦,需要一个清晰、明确的规则来传递参数⁵⁰。此处设定一个比较简单的规则:用 9 号位置专门储存函数得到的结果,起别名 ans。同时做这样一个限制:函数最多有 4 个参数⁵¹,把 10-13 位置用作参数存储,给它们分别起名 arg0 到 arg3。那么在我们做出了看起来还算满意的内存分配后,目前看来大概是这么分布的⁵²:



图 6: 设想中的一种内存分配方式

⁵⁰规则: x86, x86-64 Linux, x86-64 Windows, ARM 各有各的传法。

 $^{^{51}4}$ 个参数:这个限制是为了简化问题,实际计算机参数传递中对于多出的部分会用到栈,但是这里不允许使用栈传递, 4 这个数字是按照 86 x86-64 Windows 可用的寄存器参数传递来的。

⁵²说明:实际的计算机中栈通常是从后向前增长的,与此处不同,注意区分。

这样我们就可以以"函数调用"的方式求 101-103 号位置均值并存储到 100 位置了,不过我们需要在每次调用函数前后都要写一段代码来维护栈,如果我们手写一切代码来维护大概是这样的:

先是 sum 函数:

```
      sum:
      mov r0, #0 ; 将 0 写入 0 号寄存器

      mov r1, arg0 ; 将 arg0 的值赋给 1 号寄存器

      mov r2, arg1 ; 将 arg1 的值赋给 2 号寄存器

      loop:

      add r0, [r1] ; 将 1 号寄存器指向的内存的值加到 0 号寄存器

      add r1, #1 ; 1 号储存器指向的内存地址加 1

      cmp r1, r2 ; 比较 1 号寄存器和 2 号寄存器的值

      jne loop ; 如果不相等, 跳转到 loop

      mov ans, r0 ; 将 0 号寄存器的值存入 ans

      sub sp, #1 ; 栈顶指针减 1

      jmp [sp] ; 跳转到栈顶指向的指令地址
```

再是 mean 函数:

最后是主程序:

最终我们总体的程序结构是这样的:

```
jmp main
sum: ...
mean: ...
main: ...
```

读者可以一步步地思考,假设 sp 最开始存储了空的栈顶 20,并体会它是如何通过精确的操作完成函数调用的。不过随之而来的我们发现每次调用函数前起手都要写这样一段

```
... ; 前面的代码
mov [sp], label1; 将 label1 的地址存入栈顶
add sp, #1 ; 栈顶指针加 1
jmp func ; 跳转到 func 函数
label: ; 为了后续继续执行添加标签
... ; 原本的后续代码
```

同样在函数结束时又要写一段

```
... ; 函数内部
sub sp, #1 ; 栈顶指针减 1
jmp [sp] ; 跳转到栈顶指向的指令地址,函数结束
```

实在是太麻烦了,显然属于重复性的劳动,于是我们从中提炼出调用和返回的指令。 既然这样,就给了简化写法的空间:定义一个指令 call func,它自动完成函数开始时压 栈、栈顶移动和跳转到函数的操作。再定义 ret,它自动完成栈顶回退、跳转到栈顶指向 的地址的操作。把这个过程抽象出来之后,我们的程序就变成了这样:

```
jmp main
sum:
   mov r0, #0 ; 将 0 写入 0 号寄存器
   mov r1, arg0 ; 将 arg0 的值赋给 1 号寄存器
   mov r2, arg1 ; 将 arg1 的值赋给 2 号寄存器
loop:

      add r0, [r1]
      ; 将 1 号寄存器指向的内存的值加到 0 号寄存器

      add r1, #1
      ; 1 号储存器指向的内存地址加 1

   cmp r1, r2 ; 比较 1 号寄存器和 2 号寄存器的值
   jne loop ; 如果不相等, 跳转到 loop
                ;将 0 号寄存器的值存入 ans
   mov ans, r0
   ret
mean:
   call sum ; 直接把 arg0 和 arg1 传给 sum
   sub arg2, arg1 ;将 arg2 减去 arg1 得到求和的长度
   div ans, arg2 ; 将 sum 得到的 ans 除以 arg2 得到均值
   ret
main:
   mov 101, #1 ;将 1 存入 101 号内存
   mov 102, #2 ;将 2 存入 102 号内存
   mov 103, #3 ; 将 3 存入 103 号内存
   mov arg0, #101 ; 将起始地址 101 存入 arg0 (含)
   mov arg1, #104 ; 将终止地址 104 存入 arg1 (不含)
   call mean; 直接把 arg0, arg1, arg2 传给 meanmov 100, ans; 将 mean 得到的 ans 存入 100 号内存
```

但是其实抽象远没有结束,还可以进一步提炼出更精简的代码。我们感觉直接操作指令的方式过于野蛮了,但是我们可以写一个简单的文本替换程序来帮我们从较为简洁的代码生成这些指令。我们假设有这样一个程序,能完成如下的替换:

原文本	替换后	说明	
""	;	注释	
;	(换行)	换行	
123	#123	立即数	
x123	123	内存地址	
a += b	add a, b	加法	
a -= b	sub a, b	减法	
a *= b	mul a, b	乘法	
a /= b	div a, b	除法	
a = b	mov a, b	赋值	
return a	mov ans, a ret	返回	
if a != b jmp addr	cmp a, b	不等跳转	
if a == b jmp addr	cmp a, b	等于跳转	
if a < b jmp addr	cmp a, b	小于跳转	
do {} while (a != b)	loop_i: cmp a, b jne loop_i	循环,其中 i 为自动分配的编号	

这样事情会变得简单很多,我们只需要写出一个更加易于理解的代码,再让这个文本替换工具把它翻译成可以被执行的指令就可以了。例如对于前面的例子,我们可以写出这样的代码(为了美观起见给每一行加上分号结尾):

```
jmp main
sum:
    r0 = 0; r1 = arg0; r2 = arg1;
    do {
       r0 += [r1];
       r1 += 1;
    }
    while (r1 != r2);
    return r0:
mean:
   call sum;
    arg2 -= arg1;
    ans /= arg2;
    ret;
main:
    x101 = 1; x102 = 2; x103 = 3; arg0 = 101; arg1 = 104;
    call mean;
    x100 = ans;
```

Compiler

事实上这个"文本替换程序"就已经是编译器的雏形了,而这里抽象出来的更适合人类阅读的代码再往下走进行逐层的抽象就会一步步地走向高级语言。熟悉 C 语言的读者应该已经发现此处我是参考了 C 语言的语法来设计的,实际上 C 语言的设计就是为了更好地表达汇编语言而诞生,最初始的 C 语言差不多每句代码都对应一句汇编,很多现代 C 语言的特性是后续才慢慢添加的。这里我们就不再深入这个话题了,感兴趣的读者可以自行了解编译器的工作原理。

既然我们看完了极简的 CPU 模型,我想还是稍微提几句现代的 CPU 为好。往下(硬件)看,现代的 CPU 指令显然比这个模型丰富的多,而且通常是多核的,每个核都有自己的寄存器、程序计数器、栈指针等。寄存器也不只是看起来的几个,而是加了另一层的抽象,使用寄存器重命名技术将物理寄存器映射到逻辑寄存器。为了提升速度,在CPU 和内存中间又插入了多级的缓存,这样 CPU 不用每次都去内存中读取数据,而是先读取缓存,如果缓存中没有再去内存中读取。在执行时,CPU 以其优化技术会对指令

Out-of-Order Execution 进行 乱序执行 ,而并不一定严格地按照代码的顺序。流水线执行、单指令多数据、 Branch Prediction 分支预测 等技术也都是现代 CPU 的特色,它们将大大提升 CPU 的性能。

往上(软件)看,从 C 语言或者其它基础语言为基石构建的高级语言拥有了越来越丰富的特色,基于它们开发的各种库与框架也让程序员写出更加可靠、高效而又可复用的代码,可以更加专注于业务逻辑的开发,这些环环相扣构成了一张严密的逻辑网络。不同Programming Paradigm Design Pattern Software Architecture的编程范式、设计模式、软件架构等概念也让程序员们在开发时有了更多的选择,而这些都是在计算机科学的基础上发展起来的。

在这里我再稍微点一下这一章的题目。本章的题目毕竟是逻辑亦数据,但是这里逻辑和数据似乎是分离开的:代码是代码,数字是数字,它们的关系又体现在哪里呢?其实这里为了理解,呈现的已经是一个经过抽象的版本,在 CPU 看来,每一条指令其实也是若干个字节。在内存中,指令和数据是混杂在一起的,只不过 CPU 会根据指令的不同来对待它们。在更高层次上,数据也可以是代码,代码也可以是数据。

但是接下来转头看向 GPU, 我们将会看到一个全然不同的世界。

2.3 那么, GPU 呢?

Graphics Processing Unit

GPU、全称 图形处理器 ,是一种专门用来处理图形计算的处理器。打游戏的 同学或许知道, 为了打开高画质高刷新的游戏, 需要一块强大的显卡, 显卡的核心就是 GPU。都是执行指令,CPU 和 GPU 有什么区别呢?

在回答这个问题前我想有必要提出一个更为根本性的问题: 渲染图形提出了怎样的特 别的需求?让我们举一个最简单的例子:在平面上绘制一个圆。我们且不讨论怎么把圆加 载到屏幕上,且就假设我们只需要把每个点都计算出来,或者更为具体地:在一个高 1080 宽 1920 的数组中计算出每个像素的颜色53,按照惯例,黑色是 0,白色是 255。看起来很 简单,我在这里用一份 C 语言代码来实现这个功能:

```
unsigned char img[1080][1920];
void draw_circle(int x, int v, int r) {
    for (int i = 0; i < 1080; i++) {
        for (int j = 0; j < 1920; j++) {
            if ((i - x) * (i - x) + (j - y) * (j - y) < r * r) {
                img[i][j] = 255;
            }
        }
    }
}
```

原理本身是十分简单的, 但是这段代码读下去我们无不发现一件事情: 两个循环的次 数一乘,单单渲染一个圆就需要 $1080 \times 1920 = 2073600$ 次的计算,考虑到加法、乘法、写 入、读取都要时间,这个数字是相当大的。如果要处理的几何体多了,那么一个程序不说 跑上 120 FPS 54的高速刷新了,或许连 30 FPS 都难保证。但是计算的需求本身客观存在, 我们无法改变这个事实,那么该怎么办呢?

按照老规矩,我们应该先想想,对于人类来说,"想象一个圆"这个过程是如何发生 的。我们显然不是在脑海中一个一个像素地去计算,而是直接画出一条边界,然后成片地 填充。与逐像素刷新过去相比,这是"一瞬间"的事情,每个像素同时计算了出来。这就 Parallel Computing 叫做 并行计算 ,为了高效进行并行计算,GPU 诞生了。

⁵³方便起见,这里只考虑黑白颜色。

デrame Per Second hit 伝 エル 的缩写,也称作帧率,许多游戏都有帧率设置。

- 2.4 位运算与bit-flag
- 3 神经网络:一个大的函数
- 3.1 知道目标就可以拟合了?
- 3.2 激活函数与非线性
- 3.3 神经网络的训练
- 3.4 如果不知道目标,只知道回报呢?
- 4 泛化性:一个矛盾
- 4.1 过拟合与欠拟合
- 4.2 网络的大小好像小于训练数据? 哪来的泛化性
- 4.3 训练好像被卡住了——香农极限
- 5 你能猜到一句话接下来要说什么?
- 5.1 什么是"废话"?
- 5.2 jpeg虽然有损,但为什么说是极其成功的?
- 5.3 熵与压缩
- 5.4 马尔可夫链

- 6 压缩即智能
- 6.1 你是如何看出对面的人心情怎么样的?
- 6.2 压缩的极限——区分能力的边界
- 6.3 从母语词汇看对事物的认识
- 6.4 压缩的本质
- 7 潜空间: 更适合机器人的编码方式
- 7.1 潜空间是什么?
- 7.2 高维空间的维数灾难
- 7.3 "空空"的空间的另一面——维数远不是储存能力的极限
- 8 但是,代价是什么:可解释性的地狱
- 8.1 想想什么是"解释"?
- 8.2 神经网络不能很好地被解释
- 9 再论网络结构
- 9.1 全连接网络
- 9.2 循环神经网络
- 9.3 卷积神经网络
- 9.4 深度学习与残差链接
- 9.5 transformer
- 9.6 自编码器与扩散模型
- 9.7 仿人的架构——专家模型

- 10 杂谈
- 10.1 矩阵式研究——场景与模型的排列组合
- 10.2 AI圈的常见行话
- 10.3 AI——生产力还是毁灭?
- 10.4 新人类与自由意志?