

# 数学基础

在介绍神经网络模型之前，我们先介绍一些数学基础知识，包括线性代数、概率论、信息论和优化等方面的基础知识。

## A 线性代数

### A.1 向量

在线性代数中，**标量** (Scalar) 是一个实数，而**向量** (Vector) 是指  $n$  个实数组成的有序数组，称为  $n$  维向量。如果没有特别说明，一个  $n$  维向量一般表示列向量，即大小为  $n \times 1$  的矩阵。

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

其中， $a_i$  称为向量  $\mathbf{a}$  的第  $i$  个分量，或第  $i$  维。

为简化书写、方便排版起见，有时会以加上**转置**符号  $\top$  的行向量（大小为  $1 \times n$  的矩阵）表示列向量。

$$\mathbf{a} = [a_1, a_2, \dots, a_n]^\top \quad (\text{A.2})$$

向量符号一般用**黑体小写字母**  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ，或**小写希腊字母**  $\alpha, \beta, \gamma$  等来表示。

## 向量的模

向量  $\mathbf{a}$  的模  $\|\mathbf{a}\|$  为

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n a_i^2}. \quad (\text{A.3})$$

## 向量的范数

在线性代数中，范数（norm）是一个表示“长度”概念的函数，为向量空间内的所有向量赋予非零的正长度或大小。对于一个  $n$  维的向量  $\mathbf{x}$ ，其常见的范数有：

$L_1$  范数：

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|. \quad (\text{A.4})$$

$L_2$  范数：

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}. \quad (\text{A.5})$$

## 常见的向量

**全 1 向量**指所有值为 1 的向量。用  $\mathbf{1}_n$  表示， $n$  表示向量的维数。 $\mathbf{1}_K = [1, \dots, 1]_{K \times 1}^T$  是  $K$  维的全 1 向量。

**one-hot 向量**表示一个  $n$  维向量，其中只有一维为 1，其余元素都为 0。在数字电路中，one-hot 是一种状态编码，指对任意给定的状态，状态寄存器中只有 1 位为 1，其余位都为 0。

## A.2 矩阵

一个大小为  $m \times n$  的**矩阵**（Matrix）是一个由  $m$  行  $n$  列元素排列成的矩形阵列。矩阵里的元素可以是数字、符号或数学式。这里，矩阵我们一般默认指数字矩阵。

一个矩阵  $A$  从左上角数起的第  $i$  行第  $j$  列上的元素称为第  $i, j$  项，通常记为  $A_{i,j}$  或  $A_{ij}$ 。

一个  $n$  维向量可以看作是  $n \times 1$  的矩阵。

## 矩阵的基本运算

如果  $A$  和  $B$  都为  $m \times n$  的矩阵，则  $A$  和  $B$  的加减也是  $m \times n$  的矩阵，其每个元素是  $A$  和  $B$  相应元素相加或相减。

$$(A + B)_{ij} = A_{ij} + B_{ij}, \quad (\text{A.6})$$

$$(A - B)_{ij} = A_{ij} - B_{ij}. \quad (\text{A.7})$$

$A$  和  $B$  的点乘  $A \odot B \in \mathbb{R}^{m \times n}$  为  $A$  和  $B$  相应元素相乘：

$$(A \odot B)_{ij} = A_{ij}B_{ij}. \quad (\text{A.8})$$

一个标量  $c$  与矩阵  $A$  乘积为  $A$  的每个元素是  $A$  的相应元素与  $c$  的乘积

$$(cA)_{ij} = cA_{ij}. \quad (\text{A.9})$$

两个矩阵的乘积仅当第一个矩阵  $A$  的列数和另一个矩阵  $B$  的行数相等时才能定义。如  $A$  是  $m \times p$  矩阵和  $B$  是  $p \times n$  矩阵，则乘积  $AB$  是一个  $m \times n$  的矩阵

$$(\mathbf{AB})_{ij} = \sum_{k=1}^p A_{ik}B_{kj} \quad (\text{A.10})$$

矩阵的乘法满足结合律和分配律：

- 结合律：  $(AB)C = A(BC)$ ,
- 分配律：  $(A + B)C = AC + BC$ ,  $C(A + B) = CA + CB$ .

$m \times n$  矩阵  $A$  的转置 (Transposition) 是一个  $n \times m$  的矩阵，记为  $A^\top$ ， $A^\top$  第  $i$  行第  $j$  列的元素是原矩阵  $A$  第  $j$  行第  $i$  列的元素，

$$(A^\top)_{ij} = A_{ji}. \quad (\text{A.11})$$

矩阵的向量化是将矩阵表示为一个列向量。这里， $\text{vec}$  是向量化算子。设  $A = [a_{ij}]_{m \times n}$ ，则

$$\text{vec}(A) = [a_{11}, a_{21}, \dots, a_{m1}, a_{12}, a_{22}, \dots, a_{m2}, \dots, a_{1n}, a_{2n}, \dots, a_{mn}]^\top.$$

## 常见的矩阵

**对称矩阵**指其转置等于自己的矩阵，即满足  $A = A^T$ 。

**对角矩阵** (Diagonal Matrix) 是一个主对角线之外的元素皆为0的矩阵。对角线上的元素可以为0或其他值。一个  $n \times n$  的对角矩阵  $A$  满足：

$$A_{ij} = 0 \text{ if } i \neq j \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n\} \quad (\text{A.12})$$

对角矩阵  $A$  也可以记为  $\mathbf{diag}(\mathbf{a})$ ， $\mathbf{a}$  为一个  $n$  维向量，并满足

$$A_{ii} = a_i. \quad (\text{A.13})$$

$n \times n$  的对角矩阵  $A = \mathbf{diag}(\mathbf{a})$  和  $n$  维向量  $\mathbf{b}$  的乘积为一个  $n$  维向量

$$\mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{diag}(\mathbf{a})\mathbf{b} = \mathbf{a} \odot \mathbf{b}, \quad (\text{A.14})$$

其中  $\odot$  表示点乘，即  $(\mathbf{a} \odot \mathbf{b})_i = a_i b_i$ 。

**单位矩阵** 是一种特殊的的对角矩阵，其主对角线元素为1，其余元素为0。 $n$  阶单位矩阵  $\mathbf{I}_n$ ，是一个  $n \times n$  的方形矩阵。可以记为  $\mathbf{I}_n = \mathbf{diag}(1, 1, \dots, 1)$ 。

一个矩阵和单位矩阵的乘积等于其本身。

$$\mathbf{A}\mathbf{I} = \mathbf{I}\mathbf{A} = \mathbf{A} \quad (\text{A.15})$$

## 矩阵的范数

矩阵的范数有很多种形式，这里我们定义其  $p$ -范数为

$$\|A\|_p = \left( \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^p \right)^{1/p}. \quad (\text{A.16})$$

## B 微积分

### B.1 导数

导数 (derivative) 是微积分学中重要的基础概念。

对于定义域和值域都是实数域的函数  $y = f(x)$ , 若  $f(x)$  在点  $x_0$  的某个邻域  $\Delta x$  内, 极限

$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} \quad (\text{B.1})$$

存在, 则称函数  $y = f(x)$  在点  $x_0$  处可导, 并导数为  $f'(x_0)$ 。

若函数  $f(x)$  在其定义域包含的某区间内每一个点都可导, 那么也可以说函数  $f(x)$  在这个区间内可导。这样, 我们可以定义函数  $f'(x)$  为函数  $f(x)$  的导函数, 通常也称为导数。

函数  $f(x)$  的导数  $f'(x)$  也可记作  $\nabla_x f(x)$ ,  $\frac{\partial f(x)}{\partial x}$  或  $\frac{\partial}{\partial x} f(x)$ 。

对于一个  $p$  维向量  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ , 函数  $y = f(\mathbf{x}) = f(x_1, \dots, x_p) \in \mathbb{R}$ , 则  $y$  关于  $\mathbf{x}$  的导数为

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_p} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^p. \quad (\text{B.2})$$

对于一个  $p$  维向量  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p$ , 函数  $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) = f(x_1, \dots, x_p) \in \mathbb{R}^q$ , 则  $\mathbf{y}$  关于  $\mathbf{x}$  的导数为

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_q(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_p} & \dots & \frac{\partial f_q(\mathbf{x})}{\partial x_p} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times q}. \quad (\text{B.3})$$

#### B.1.1 导数法则

导数满足如下法则:

加(减)法则  $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}), \mathbf{z} = g(\mathbf{x})$  则

$$\frac{\partial(\mathbf{y} + \mathbf{z})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} \quad (\text{B.4})$$

乘法法则 (1) 若  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p, \mathbf{y} = f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^q, \mathbf{z} = g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^q$ , 则

$$\frac{\partial \mathbf{y}^\top \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{z} + \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{y} \quad (\text{B.5})$$

(2) 若  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p, \mathbf{y} = f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^s, \mathbf{z} = g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^t, A \in \mathbb{R}^{s \times t}$  和  $\mathbf{x}$  无关, 则

$$\frac{\partial \mathbf{y}^\top A \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} A \mathbf{z} + \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} A^\top \mathbf{y} \quad (\text{B.6})$$

(3) 若  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p, y = f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}, \mathbf{z} = g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^p$ , 则

$$\frac{\partial y \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} = y \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{z}^\top \quad (\text{B.7})$$

链式法则 链式法则 (chain rule), 是求复合函数导数的一个法则, 是在微积分中计算导数的一种常用方法。

(1) 若  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^p, \mathbf{y} = g(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^s, \mathbf{z} = f(\mathbf{y}) \in \mathbb{R}^t$ , 则

$$\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{y}} \quad (\text{B.8})$$

(2) 若  $X \in \mathbb{R}^{p \times q}$  为矩阵,  $Y = g(X) \in \mathbb{R}^{s \times t}, z = f(Y) \in \mathbb{R}$ , 则

$$\frac{\partial z}{\partial X_{ij}} = \text{tr} \left( \left( \frac{\partial z}{\partial Y} \right)^\top \frac{\partial Y}{\partial X_{ij}} \right) \quad (\text{B.9})$$

(3) 若  $X \in \mathbb{R}^{p \times q}$  为矩阵,  $\mathbf{y} = g(X) \in \mathbb{R}^s, z = f(\mathbf{y}) \in \mathbb{R}$ , 则

$$\frac{\partial z}{\partial X_{ij}} = \left( \frac{\partial z}{\partial \mathbf{y}} \right)^\top \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial X_{ij}} \quad (\text{B.10})$$

(4) 若  $x \in \mathbb{R}, \mathbf{u} = u(x) \in \mathbb{R}^p, \mathbf{g} = g(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^q$ , 则

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial x} = \left( \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}} \right) \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \quad (\text{B.11})$$

## B.2 常见函数的导数

这里我们介绍几个本书中常用的函数。

### B.2.1 标量函数及其导数

指示函数 指示函数  $I(x = c)$  为

$$I(x = c) = \begin{cases} 1 & \text{if } x = c, \\ 0 & \text{else } 0. \end{cases} \quad (\text{B.12})$$

指示函数  $I(x = c)$  除了在  $c$  外, 其导数为 0。

多项式函数 如果  $f(x) = x^r$ , 其中  $r$  是非零实数, 那么导数

$$\frac{\partial x^r}{\partial x} = r x^{r-1}. \quad (\text{B.13})$$

当  $r = 0$  时, 常函数的导数是 0。

指数函数 底数为  $e$  的指数函数  $f(x) = \exp(x) = e^x$  的导数是它本身。

$$\frac{\partial \exp(x)}{\partial x} = \exp(x). \quad (\text{B.14})$$

对数函数 底数为  $e$  对数函数  $\log(x)$  的导数则是  $x^{-1}$ 。

$$\frac{\partial \log(x)}{\partial x} = \frac{1}{x}. \quad (\text{B.15})$$

### B.2.2 向量函数及其导数

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = I, \quad (\text{B.16})$$

$$\frac{\partial A\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = A^\top, \quad (\text{B.17})$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top A}{\partial \mathbf{x}} = A \quad (\text{B.18})$$

### B.2.3 按位计算的向量函数及其导数

假设一个函数  $f(x)$  的输入是标量  $x$ 。对于一组  $K$  个标量  $x_1, \dots, x_K$ , 我们可以通过  $f(x)$  得到另外一组  $K$  个标量  $z_1, \dots, z_K$ ,

$$z_k = f(x_k), \forall k = 1, \dots, K \quad (\text{B.19})$$

为了简便起见,我们定义  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_K]^\top$ ,  $\mathbf{z} = [z_1, \dots, z_K]^\top$ ,

$$\mathbf{z} = f(\mathbf{x}), \quad (\text{B.20})$$

其中,  $f(\mathbf{x})$  是按位运算的, 即  $(f(\mathbf{x}))_i = f(x_i)$ 。

当  $x$  为标量时,  $f(x)$  的导数记为  $f'(x)$ 。当输入为  $K$  维向量  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_K]^\top$  时, 其导数为一个对角矩阵。

$$\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} = \left[ \frac{\partial f(x_j)}{\partial x_i} \right]_{K \times K} \quad (\text{B.21})$$

$$= \begin{bmatrix} f'(x_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & f'(x_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f'(x_K) \end{bmatrix} \quad (\text{B.22})$$

$$= \mathbf{diag}(f'(\mathbf{x})). \quad (\text{B.23})$$

## B.2.4 Logistic 函数

Logistic 函数是一种常用的 S 形函数, 是比利时数学家 Pierre François Verhulst 在 1844-1845 年研究种群数量的增长模型时提出的命名的, 最初作为一种生态学模型。

Logistic 函数定义为:

$$\text{logistic}(x) = \frac{L}{1 + \exp(-k(x - x_0))}, \quad (\text{B.24})$$

这里  $\exp()$  函数表示自然对数,  $x_0$  是中心点,  $L$  是最大值,  $k$  是曲线的倾斜度。图 B.1 给出了几种不同参数的 logistic 函数曲线。当  $x$  趋向于  $-\infty$  时,  $\sigma(x)$  接近于 0; 当  $x$  趋向于  $+\infty$  时,  $\sigma(x)$  接近于  $L$ 。

一般使用标准 logistic 函数 (记为  $\sigma(x)$ ), 即参数为  $(k = 1, x_0 = 0, L = 1)$ ,

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}. \quad (\text{B.25})$$

标准 logistic 函数在机器学习中使用得非常广泛, 经常用来将一个实数空间的数映射到  $(0, 1)$  区间。



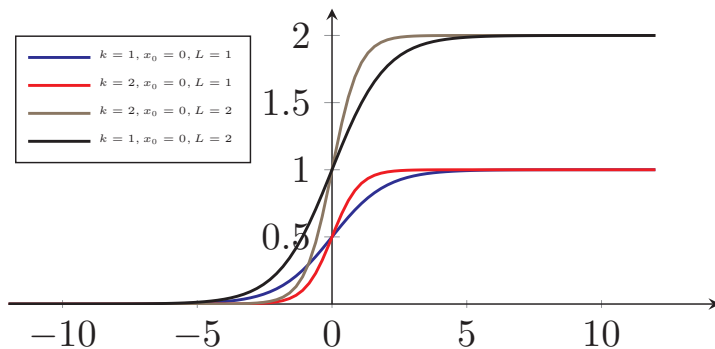


图 B.1: Logistic 函数

标准 logistic 函数的导数为

$$\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x)) \quad (\text{B.26})$$

当输入为  $K$  维向量  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_K]^\top$  时, 其导数为

$$\sigma'(\mathbf{x}) = \mathbf{diag}(\sigma(\mathbf{x}) \odot (1 - \sigma(\mathbf{x}))). \quad (\text{B.27})$$

## B.2.5 softmax 函数

softmax 函数是将多个标量映射为一个概率分布。

对于  $K$  个标量  $x_1, \dots, x_K$ , softmax 函数定义为

$$z_k = \text{softmax}(x_k) = \frac{\exp(x_k)}{\sum_{i=1}^K \exp(x_i)}, \quad (\text{B.28})$$

这样, 我们可以将  $K$  个变量  $x_1, \dots, x_K$  转换为一个分布:  $z_1, \dots, z_K$ , 满足

$$z_k \in [0, 1], \forall k, \quad \sum_{i=1}^K z_k = 1. \quad (\text{B.29})$$

当 softmax 函数的输入为  $K$  维向量  $\mathbf{x}$  时,

$$\hat{\mathbf{z}} = \text{softmax}(\mathbf{x}) \quad (\text{B.30})$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\sum_{k=1}^K \exp(x_k)} \begin{bmatrix} \exp(x_1) \\ \vdots \\ \exp(x_K) \end{bmatrix} \\
&= \frac{\exp(\mathbf{x})}{\sum_{k=1}^K \exp(x_k)} \\
&= \frac{\exp(\mathbf{x})}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})}, \tag{B.31}
\end{aligned}$$

其中,  $\mathbf{1}_K = [1, \dots, 1]_{K \times 1}$  是  $K$  维的全 1 向量。

其导数为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \text{softmax}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} &= \frac{\partial \left( \frac{\exp(\mathbf{x})}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} \right)}{\partial \mathbf{x}} \\
&= \frac{1}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} \frac{\partial \exp(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \left( \frac{1}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} \right)}{\partial \mathbf{x}} (\exp(\mathbf{x}))^\top \\
&= \frac{\mathbf{diag}(\exp(\mathbf{x}))}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} - \left( \frac{1}{(\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x}))^2} \right) \frac{\partial (\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x}))}{\partial \mathbf{x}} (\exp(\mathbf{x}))^\top \\
&= \frac{\mathbf{diag}(\exp(\mathbf{x}))}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} - \left( \frac{1}{(\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x}))^2} \right) \mathbf{diag}(\exp(\mathbf{x})) \mathbf{1}_K (\exp(\mathbf{x}))^\top \\
&= \frac{\mathbf{diag}(\exp(\mathbf{x}))}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} - \left( \frac{1}{(\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x}))^2} \right) \exp(\mathbf{x}) (\exp(\mathbf{x}))^\top \\
&= \mathbf{diag} \left( \frac{\exp(\mathbf{x})}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} \right) - \frac{\exp(\mathbf{x})}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} \cdot \frac{(\exp(\mathbf{x}))^\top}{\mathbf{1}_K^\top \exp(\mathbf{x})} \\
&= \mathbf{diag}(\text{softmax}(\mathbf{x})) - \text{softmax}(\mathbf{x}) \text{softmax}(\mathbf{x})^\top, \tag{B.32}
\end{aligned}$$

其中,  $\mathbf{diag}(\exp(\mathbf{x})) \mathbf{1}_K = \exp(\mathbf{x})$ 。

详细的矩阵偏导数参考[https://en.wikipedia.org/wiki/Matrix\\_calculus](https://en.wikipedia.org/wiki/Matrix_calculus)。

## C 数学优化

数学优化问题 (mathematical optimization), 也叫最优化问题, 是指在一定约束条件下, 求解一个目标函数的最大值 (或最小值) 问题。

数值优化问题的定义为: 给定一个目标函数 (也叫代价函数)  $f: A \rightarrow \mathbb{R}$ , 寻找一个变量 (也叫参数)  $\mathbf{x}^* \in A$ , 使得对于所有  $A$  中的  $\mathbf{x}$ ,  $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$  (最小化); 或者  $f(\mathbf{x}^*) \geq f(\mathbf{x})$  (最大化)。这里,  $A$  为变量  $\mathbf{x}$  的约束集, 也叫可行域;  $A$  中的变量被称为是可行解。

### C.0.1 数学优化的类型

#### 离散优化和连续优化

根据输入变量  $\mathbf{x}$  的值域是否为实数域, 数值优化问题可以分为离散优化问题和连续优化问题。

**离散优化问题** 离散优化 (Discrete Optimization) 问题是目标函数的输入变量为离散变量, 比如为整数或有限集中的元素。离散优化问题主要有两个分支:

1. **组合优化 (Combinatorial Optimization)**: 其目标是从一个有限集合中找出使得目标函数最优的元素。在一般的组合优化问题中, 集合中的元素之间存在一定的关联, 可以表示为图结构。典型的组合优化问题有旅行商问题、最小生成树问题、图着色问题等。很多机器学习问题都是组合优化问题, 比如特征选择、聚类问题、超参数优化问题以及结构化学习 (Structured Learning) 中标签预测问题等。
2. **整数规划 (Integer Programming)**: 输入变量  $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$  为整数。一般常见的整数规划问题为**整数线性规划 (Integer Linear Programming, ILP)**。整数线性规划的一种最直接的求解方法是: 1) 去掉输入为整数的限制, 得到一个就成为一个一般的线性规划问题, 这个线性规划问题为原整数线性规划问题的松弛问题; 2) 求得相应松弛问题的解; 3) 把松弛问题的解四舍五入到最接近的整数。但是这种方法得到的解一般都不是最优的, 因此原问题的最优解不一定在松弛问题最优解的附近。另外, 这种方法得到的解也不一定满足约束条件。

离散优化问题的求解一般都比较困难，优化算法的复杂度都比较高。

**连续优化问题** 连续优化（Continuous Optimization）问题是目标函数的输入变量为连续变量  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ ，即目标函数为实函数。

本节后面的内容主要以连续优化为主。

### 无约束优化和约束优化

在连续优化问题中，根据是否有变量的约束条件，可以将优化问题分为无约束优化问题和约束优化问题。

**无约束优化问题**（Unconstrained Optimization）的可行域为整个实数域  $A = \mathbb{R}^d$ ，可以写为

最优化问题一般可以表示为求最小值问题。求  $f(\mathbf{x})$  最大值等价于求  $-f(\mathbf{x})$  的最小值。

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \quad (\text{C.1})$$

其中， $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$  为输入变量； $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  为目标函数。

**约束优化问题**（Constrained Optimization）中变量  $\mathbf{x}$  需要满足一些等式或不等式的约束，可写为

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{subject to} \quad & c_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, m \\ & c_j(\mathbf{x}) \leq 0, \quad j = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

其中， $c_i(x)$  为等式约束函数； $c_j(x)$  为不等式约束函数。

有约束条件的约束问题常常可以通过拉格朗日乘数转化为非约束问题。

**拉格朗日乘数法** 拉格朗日乘数法（以数学家约瑟夫·拉格朗日命名）是一种有约束条件的约束优化方法。这种方法将一个有  $n$  个变量与  $k$  个约束条件的最优化问题转换为一个有  $n + k$  个变量的方程组的极值问题，其变量不受任何约束。这种方法引入了一种新的标量未知数，即拉格朗日乘数  $\lambda$ ：约束方程的梯度（gradient）的线性组合里每个向量的系数。拉格朗日  $\Lambda$  定义为

$$\Lambda(\mathbf{x}, \lambda) = f(\mathbf{x}) + \sum_k \lambda_k(c_k) \quad (\text{C.3})$$

## 线性优化和非线性优化

如果在公式C.2中，目标函数和所有的约束函数都为线性函数，则该问题为**线性规划问题**（Linear Programming）。相反，如果目标函数或任何一个约束函数为非线性函数，则该问题为**非线性规划问题**（Nonlinear Programming）。

在非线形优化问题中，有一类比较特殊的问题是**凸优化问题**（Convex Programming）。在凸优化问题中，变量 $\mathbf{x}$ 的可行域为凸集，即对于集合中任意两点，它们的连线全部位于在集合内部。目标函数 $f$ 也必须为凸函数，即满足

$$f(\alpha\mathbf{x} + (1 - \alpha)\mathbf{y}) \leq \alpha f(\mathbf{x}) + (1 - \alpha)f(\mathbf{y}), \forall \alpha \in [0, 1]. \quad (\text{C.4})$$

凸优化问题是一种特殊的约束优化问题，需满足目标函数为凸函数，并且等式约束函数为线性函数，不等式约束函数为凹函数。

## C.1 优化算法

优化问题一般都是通过迭代的方式来求解：通过猜测一个初始的估计 $\mathbf{x}_0$ ，然后不断迭代产生新的估计 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_t$ ，希望 $\mathbf{x}_t$ 最终收敛到期望的最优解 $\mathbf{x}^*$ 。一个好的优化算法应该是在一定的时间或空间复杂度下能够快速准确地找到最优解。同时，好的优化算法受初始猜测点的影响较小，通过迭代能稳定地找到最优解 $\mathbf{x}^*$ 的邻域，然后迅速收敛于 $\mathbf{x}^*$ 。

优化算法中常用的迭代方法有线性搜索和置信域方法等。线性搜索的策略是寻找方向和步长，具体算法有梯度下降法、牛顿法、共轭梯度法等。

### 全局最优和局部最优

对于很多非线性优化问题，会存在若干个局部的极小值。**局部最小值**，或**局部最优解** $\mathbf{x}^*$ 定义为：存在一个 $\delta > 0$ ，对于所有的满足 $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\| \leq \delta$ 的 $\mathbf{x}$ ，公式 $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ 成立。也就是说，在 $\mathbf{x}^*$ 的附近区域内，所有的函数值都大于或者等于 $f(\mathbf{x}^*)$ 。

所对于所有的 $\mathbf{x} \in A$ ，都有 $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ 成立，则 $\mathbf{x}^*$ 为**全局最小值**，或**全局最优解**。

一般的，求局部最优解是容易的，但很难保证其为全局最优解。对于线性规划或凸优化问题，局部最优解就是全局最优解。

要确认一个点  $\mathbf{x}^*$  是否为局部最优解，通过比较它的邻域内有没有更小的函数值是不现实的。如果函数  $f(\mathbf{x})$  是二次连续可微的，我们可以通过检查目标函数在点  $\mathbf{x}^*$  的梯度  $\nabla f(\mathbf{x}^*)$  和 Hessian 矩阵  $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$  来判断。

**定理 C.1** – 局部最小值的一阶必要条件： 如果  $\mathbf{x}^*$  为局部最优解并且函数  $f$  在  $\mathbf{x}^*$  的邻域内一阶可微，则在  $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ 。

证明. 如果函数  $f(\mathbf{x})$  是连续可微的，根据泰勒展开公式 (Taylor's Formula)，函数  $f(\mathbf{x})$  的一阶展开可以近似为

$$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \Delta\mathbf{x}^\top \nabla f(\mathbf{x}^*), \quad (\text{C.5})$$

假设  $\nabla f(\mathbf{x}^*) \neq 0$ ，则可以找到一个  $\Delta\mathbf{x}$  (比如  $\Delta\mathbf{x} = -\alpha \nabla f(\mathbf{x}^*)$ ， $\alpha$  为很小的正数)，使得

$$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*) = \Delta\mathbf{x}^\top \nabla f(\mathbf{x}^*) \leq 0. \quad (\text{C.6})$$

这和局部最优的定义矛盾。 □

**定理 C.2** – 局部最优解的二阶必要条件： 如果  $\mathbf{x}^*$  为局部最优解并且函数  $f$  在  $\mathbf{x}^*$  的邻域内二阶可微，则在  $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$ ， $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$  为半正定矩阵。

证明. 如果函数  $f(\mathbf{x})$  是二次连续可微的，函数  $f(\mathbf{x})$  的二阶展开可以近似为

$$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}^*) + \Delta\mathbf{x}^\top \nabla f(\mathbf{x}^*) + \frac{1}{2} \Delta\mathbf{x}^\top (\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)) \Delta\mathbf{x}. \quad (\text{C.7})$$

有一阶必要性定理可知  $\nabla f(\mathbf{x}^*) = 0$  则

$$f(\mathbf{x}^* + \Delta\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}^*) = \frac{1}{2} \Delta\mathbf{x}^\top (\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)) \Delta\mathbf{x} \geq 0. \quad (\text{C.8})$$

即  $\nabla^2 f(\mathbf{x}^*)$  为半正定矩阵。 □

## 梯度下降法

**梯度下降法** (Gradient Descent Method), 也叫**最速下降法** (Steepest Descent Method), 经常用来求解无约束优化的极小值问题。

对于函数  $f(\mathbf{x})$ , 如果  $f(\mathbf{x})$  在点  $\mathbf{x}_t$  附近是连续可微的, 那么  $f(\mathbf{x})$  下降最快的方向是  $f(\mathbf{x})$  在  $\mathbf{x}_t$  点的梯度方法的反方向。

根据泰勒一阶展开公式,

$$f(\mathbf{x}_{t+1}) = f(\mathbf{x}_t + \Delta \mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_t) + \Delta \mathbf{x}^\top \nabla f(\mathbf{x}_t). \quad (\text{C.9})$$

要使得  $f(\mathbf{x}_{t+1}) < f(\mathbf{x}_t)$ , 就得使  $\Delta \mathbf{x}^\top \nabla f(\mathbf{x}_t) < 0$ 。我们取  $\Delta \mathbf{x} = -\alpha \nabla f(\mathbf{x}_t)$ 。如果  $\alpha > 0$  为一个够小数值时, 那么  $f(\mathbf{x}_{t+1}) < f(\mathbf{x}_t)$  成立。

这样, 我们可以从一个初始估计  $\mathbf{x}_0$  出发, 通过迭代公式

$$\mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{x}_t - \alpha_t \nabla f(\mathbf{x}_t), \quad t \geq 0. \quad (\text{C.10})$$

生成序列  $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$  使得

$$f(\mathbf{x}_0) \geq f(\mathbf{x}_1) \geq f(\mathbf{x}_2) \geq \dots \quad (\text{C.11})$$

如果顺利的话序列,  $(\mathbf{x}_n)$  收敛到局部最优解  $\mathbf{x}^*$ 。注意每次迭代步长  $\alpha$  可以改变, 其取值必须合适, 如果过大就不会收敛, 如果过小则收敛速度太慢。

梯度下降法的过程如图C.1所示。曲线是等高线 (水平集), 即函数  $f$  为不同常数的集合构成的曲线。红色的箭头指向该点梯度的反方向 (梯度方向与通过该点的等高线垂直)。沿着梯度下降方向, 将最终到达函数  $f$  值的局部最优解。

梯度下降法为一阶收敛算法, 当靠近极小值时梯度变小, 收敛速度会变慢, 并且可能以“之字形”的方式下降。如果目标函数为二阶连续可微, 我们可以采用牛顿法。牛顿法为二阶收敛算法, 收敛速度更快, 但是每次迭代需要计算 Hessian 矩阵的逆矩阵, 复杂较高。

相反地, 如果我们要求解一个最大值问题, 就需要向梯度正方向迭代进行搜索, 逐渐接近函数的局部极大值点, 这个过程则被称为梯度上升法 (gradient ascent)。

关于数学优化的内容, 可以阅读《Numerical Optimization》[Nocedal and Wright, 2006] 和《Convex Optimization》[Boyd and Vandenberghe, 2004]。

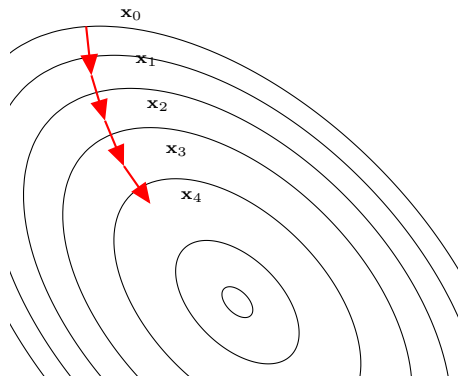


图 C.1: 梯度下降法

## D 概率论基础

概率论是研究大量随机现象中数量规律的数学分支。

### D.1 样本空间

**样本空间**是一个实验或随机试验所有可能结果的集合，而随机试验中的每个可能结果称为样本点。通常用 $\Omega$ 表示。例如，如果抛掷一枚硬币，那么样本空间就是集合{正面，反面}。如果投掷一个骰子，那么样本空间就是{1, 2, 3, 4, 5, 6}。

有些实验有两个或多个可能的样本空间。例如，从52张扑克牌中随机抽出一张，一个可能的样本空间是数字（A到K），另外一个可能的样本空间是花色（黑桃，红桃，梅花，方块）。如果要完整地描述一张牌，就需要同时给出数字和花色，这时的样本空间可以通过构建上述两个样本空间的笛卡儿乘积来得到。

### D.2 事件和概率

随机事件（或简称事件）指的是一个被赋予机率的事物集合，也就是样本空间中的一个子集。**概率**表示对一个随机事件发生的可能性大小，为0到1之间的一个非负实数。



## 数学小知识 | 笛卡儿乘积

在数学中，两个集合  $X$  和  $Y$  的笛卡儿乘积（Cartesian product），又称直积，在集合论中表示为  $X \times Y$ ，是所有可能的有序对组成的集合，其中有序对的第一个对象是  $X$  的成员，第二个对象是  $Y$  的成员。

$$X \times Y = \{\langle x, y \rangle \mid x \in X \wedge y \in Y\}.$$

举个实例，如果集合  $X$  是13个元素的点数集合  $\{A, K, Q, J, 10, 9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2\}$ ，而集合  $Y$  是4个元素的花色集合  $\{\spadesuit, \heartsuit, \diamondsuit, \clubsuit\}$ ，则这两个集合的笛卡儿积是有52个元素的标准扑克牌的集合  $\{(A, \spadesuit), (K, \spadesuit), \dots, (2, \spadesuit), (A, \heartsuit), \dots, (3, \clubsuit), (2, \clubsuit)\}$ 。

比如，一个0.5的概率表示一个事件有50%的可能性发生。

对于一个机会均等的抛硬币动作来说，其样本空间为“正面”或“反面”。下面各个随机事件的概率分别为：

- $\{\text{正面}\}$ ，其概率为0.5；
- $\{\text{反面}\}$ ，其概率为0.5；
- $\{\} = \emptyset$ ，不是正面也不是反面，其概率为0；
- $\{\text{正面}, \text{反面}\}$ ，不是正面就是反面，这是，其概率为1。

### D.2.1 随机变量

在随机实验中，很多问题是与数值发生关系，试验的结果可以用一个数  $X$  来表示，这个数  $X$  是随着试验结果的不同而变化的，是样本点的一个函数。我们把这种数称为**随机变量**。

例如，随机掷一个骰子，得到的点数就可以看成一个随机变量  $X$ ， $X$  的取值为  $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ 。

如果随机掷两个骰子，整个事件空间可以由36个元素组成：

$$\Omega = \{(i, j) \mid i = 1, \dots, 6; j = 1, \dots, 6\} \quad (\text{D.1})$$

这里可以构成多个随机变量，比如随机变量  $X$ （获得的两个骰子的点数和）或者随机变量  $Y$ （获得的两个骰子的点数差），随机变量  $X$  可以有 11 个整数值，而随机变量  $Y$  只有 6 个。

$$X(i, j) := i + j, \quad x = 2, 3, \dots, 12 \quad (\text{D.2})$$

$$Y(i, j) := |i - j|, \quad y = 0, 1, 2, 3, 4, 5. \quad (\text{D.3})$$

又比如，在一次扔硬币事件中，如果把获得的背面的次数作为随机变量  $X$ ，则  $X$  可以取两个值，分别是 0 和 1。

### 离散随机变量

如果随机变量  $X$  所可能取的值为有限可列举的，假设有  $n$  个有限取值  $\{x_1, \dots, x_n\}$ 。  $X$  称为**离散随机变量**。我们一般用大写的字母表示一个随机变量，用小写字母表示该变量的某一个具体的取值。

要了解  $X$  的统计规律，就必须知道它取每种可能值  $x_i$  的概率，即

$$P(X = x_i) = p(x_i), i = 1 \dots, n \quad (\text{D.4})$$

$p(x_i), i = 1 \dots, n$  称为离散型随机变量  $X$  的**概率分布或分布**，并且满足

$$\sum_{i=1}^n P(x_i) = 1 \quad (\text{D.5})$$

$$P(x_i) \geq 0, \quad i = 1 \dots, n \quad (\text{D.6})$$

下面看些常见的离散随机变量以及其概率分布的例子。

**[伯努利分布]** 在一次试验中，事件  $A$  出现的概率为  $p$ ，不出现的概率为  $q = 1 - p$ 。若用变量  $X$  表示事件  $A$  出现的次数，则  $X$  的取值为 0 和 1，其相应的分布为： $P(X = 0) = q, P(X = 1) = p$ 。这个分布称为伯努利分布（Bernoulli distribution），又名两点分布或者 0-1 分布。

**[二项分布]** 在  $n$  次伯努利分布中，若以变量  $X$  表示事件  $A$  出现的次数，则  $X$  的取值为  $\{0, \dots, n\}$ ，其相应的分布为：

$$P(X = k) = \binom{n}{k} p^k q^{n-k}, \quad k = 1 \dots, n \quad (\text{D.7})$$

这里， $\binom{n}{k}$  为二项式系数（这就是二项分布的名称的由来），表示从  $n$  个元素中取出  $k$  个元素而不考虑其顺序的**组合**的总数。

## 数学小知识 | 排列组合

排列组合是组合学最基本的概念。所谓**排列**，就是指从给定个数的元素中取出指定个数的元素进行排序。**组合**则是指从给定个数的元素中仅仅取出指定个数的元素，不考虑排序。排列组合的中心问题是研究给定要求的排列和组合可能出现的情况总数。

排列的任务是确定  $n$  个不同的元素的排序的可能性。 $n$  个不同的元素可以有  $n!$  种不同的排列方式，即  $n$  的阶乘。

$$n! = n \times (n-1) \times \cdots \times 3 \times 2 \times 1.$$

如果从  $n$  个元素中取出  $k$  个元素，这  $k$  个元素的排列总数为

$$P_n^k = n \times (n-1) \times \cdots \times (n-k+1) = \frac{n!}{(n-k)!}.$$

从  $n$  个元素中取出  $k$  个元素，这  $k$  个元素可能出现的组合数为

$$C_n^k = \binom{n}{k} = \frac{P_n^k}{k!} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

区分排列与组合的关键是“有序”与“无序”。

## 连续随机变量

与离散随机变量不同，一些随机变量  $X$  的取值是不可列举的，由全部实数或者由一部分区间组成，比如

$$X = \{x | a \leq x \leq b\}, \quad -\infty < a < b < \infty$$

则称  $X$  为**连续随机变量**，连续随机变量的值是不可数及无穷尽的。

对于连续随机变量  $X$ ，它取一个具体值  $x_i$  的概率为 0，这个离散随机变量截然不同。因此用列举连续随机变量取某个值的概率来描述这种随机变量不但做不到，也毫无意义。

我们一般用**密度函数**  $p(x)$  来描述连续随机变量  $X$  的概率分布。 $p(x)$  为可积函数，并满足

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1 \quad (\text{D.8})$$

$$p(x) \geq 0. \quad (\text{D.9})$$

给定密度函数 $p(x)$ ,便可以计算出随机变量落入某一个区间的概率,而 $p(x)$ 本身反映了随机变量取落入 $x$ 的非常小的邻近区间中的概率大小。

下面看些常见的连续随机变量以及其概率分布的例子。

[均匀分布] 若 $a, b$ 为有限数,有下面密度函数定义分布称为 $[a, b]$ 上的均匀分布 (Uniform Distribution)。

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & , a \leq x \leq b \\ 0 & , x < a \text{ 或 } x > b \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

[正态分布] 正态分布 (Normal Distribution), 又名高斯分布, 是自然界最常见的一种分布, 并且具有很多良好的性质, 在很多领域都有非常重要的影响力, 其概率密度函数为

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (\text{D.11})$$

其中,  $\sigma > 0$ ,  $\mu$  和  $\sigma$  均为常数。若随机变量  $X$  服从一个位置参数为  $\mu$  和  $\sigma$  的概率分布, 简记为

$$X \sim N(\mu, \sigma^2). \quad (\text{D.12})$$

当  $\mu = 0$ ,  $\sigma = 1$  时, 称为标准正态分布。

图D.1a和D.1b分别显示了均匀分布和正态分布的密度函数。

## D.2.2 随机向量

随机向量是指一组随机变量构成的向量。如果  $X_1, X_2, \dots, X_n$  为  $n$  个随机变量, 那么称  $(X_1, X_2, \dots, X_n)$  为一个  $n$  维随机向量。一维随机向量称为随机变量。

随机向量也分为离散随机向量和连续随机向量。

一般, 离散随机向量的 (联合) 概率分布为

$$P(X_1 = x_{i_1}, X_2 = x_{i_2}, \dots, X_n = x_{i_n}) = p(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n}), \quad (\text{D.13})$$

$$x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n} = 1, 2, \dots$$

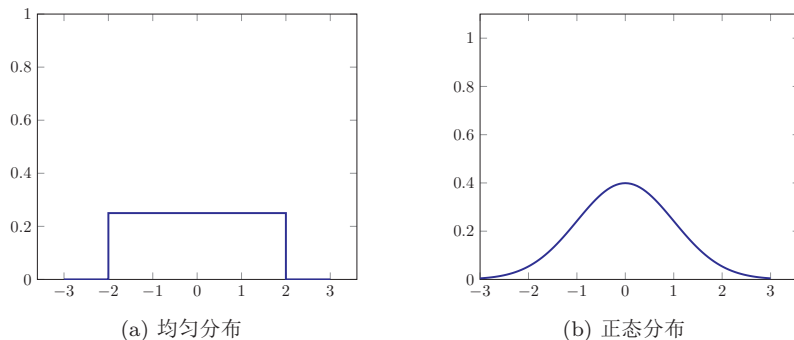


图 D.1: 连续随机变量的密度函数

和离散随机变量类似，离散随机向量的概率分布满足

$$p(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n}) \geq 0, \quad x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n} = 1, 2, \dots \quad (\text{D.14})$$

$$\sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_n} p(x_{i_1}, x_{i_2}, \dots, x_{i_n}) = 1. \quad (\text{D.15})$$

对连续型随机向量，其（联合）密度函数满足

$$p(x_1, \dots, x_n) \geq 0, \quad (\text{D.16})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} p(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = 1. \quad (\text{D.17})$$

[多元正态分布] 若  $n$  维随机向量  $X = [X_1, \dots, X_N]^T$  服从  $n$  元正态分布，其密度函数为

$$p(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\Sigma|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x - \mu)^T \Sigma^{-1}(x - \mu)\right), \quad (\text{D.18})$$

其中， $\Sigma$  为正定对称矩阵； $\Sigma^{-1}$  表示  $\Sigma$  的逆阵； $|\Sigma|$  表示  $\Sigma$  的行列式；向量  $\mu = [\mu_1, \dots, \mu_N]^T$  为列向量。

多项分布 在  $n$  次伯努利分布中，若以变量  $X$  表示事件 A 出现的次数，则  $X$  的取值为  $\{0, \dots, n\}$ ，其相应的分布为：

$$P(X = k) = \binom{n}{k} p^k q^{n-k}, \quad k = 1 \dots, n \quad (\text{D.19})$$

这里,  $\binom{n}{k}$  为二项系数 (这就是二项分布的名称的由来), 表示从  $n$  个元素中取出  $k$  个元素而不考虑其顺序的**组合**的总数。

把二项分布推广到随机向量, 就得到了多项分布。假设一个袋子中装了很多球, 总共有  $k$  个不同的颜色。我们从袋子中取出  $n$  个球。每次取出一个球时, 就在袋子中放入一个同样颜色的球。这样保证每次取到同颜色的球的概率是相等的。我们定义一个  $k$  维随机向量  $X$ ,  $X_i$  定义为取出的  $n$  个球中颜色为  $i$  的球的数量 ( $i = 1, \dots, k$ )。  $\theta_i$  定义为每次抽取的球颜色为  $i$  的概率。  $X$  服从多项分布, 其概率分布为:

$$p(x_1, \dots, x_k | \theta) = P(X_1 = x_1, \dots, X_k = x_k | \theta_1, \dots, \theta_k) \quad (\text{D.20})$$

$$= \frac{n!}{x_1! \cdots x_k!} p_1^{x_1} \cdots p_k^{x_k}, \quad (\text{D.21})$$

其中,  $x_1, \dots, x_k$  为非负整数, 并且满足  $\sum_{i=1}^k x_i = n$ 。

多项分布的概率分布也可以用 gamma 函数表示:

$$p(x_1, \dots, x_k | \theta) = \frac{\Gamma(\sum_i x_i + 1)}{\prod_i \Gamma(x_i + 1)} \prod_{i=1}^k \theta_i^{x_i}. \quad (\text{D.22})$$

从这种表示形式和 Dirichlet 分布类似, 而 Dirichlet 分布可以作为多项分布的共轭先验。

### D.2.3 边际分布

为了方便起见, 我们下面以二维随机向量进行讨论, 多维时这些结论依然成立。对于二维离散随机向量  $(X, Y)$ , 假设  $X$  取值为  $x_1, x_2, \dots$ ;  $Y$  取值为  $y_1, y_2, \dots$ 。其联合概率分布满足

$$p(x_i, y_j) \geq 0, \quad \sum_{i,j} p(x_i, y_j) = 1. \quad (\text{D.23})$$

对于联合概率分布  $p(x_i, y_j)$ , 我们可以分别对  $i$  和  $j$  进行求和。

(1) 对于固定的  $i$ ,

$$\sum_j p(x_i, y_j) = P(X = x_i) = p(x_i). \quad (\text{D.24})$$

(2) 对于固定的  $j$ ,

$$\sum_i p(x_i, y_j) = P(Y = y_j) = p(y_j). \quad (\text{D.25})$$

也就是说，由离散随机向量  $(X, Y)$  的联合概率分布，对  $Y$  的所有取值进行求和得到  $X$  的概率分布；而对  $X$  的所有取值进行求和得到  $Y$  的概率分布。这里  $p(x_i)$  和  $p(y_j)$  就称为  $p(x_i, y_j)$  的**边际分布**。

对于二维连续随机向量  $(X, Y)$ ，其边际分布为：

$$p(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, y) dy \quad (\text{D.26})$$

$$p(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, y) dx \quad (\text{D.27})$$

对于二元正态分布，其边际分布仍为正态分布。

## D.2.4 条件分布

对于离散随机向量  $(X, Y)$ ，已知  $X = x_i$  的条件下，随机变量  $Y = y_j$  的条件概率为：

$$P(Y = y_j | X = x_i) = \frac{P(X = x_i, Y = y_j)}{P(X = x_i)} = \frac{p(x_i, y_j)}{p(x_i)}. \quad (\text{D.28})$$

这个公式定义了随机变量  $Y$  关于随机变量  $X$  的**条件分布**。

对于二维连续随机向量  $(X, Y)$ ，已知  $X = x$  的条件下，随机变量  $Y = y$  的**条件密度函数**为

$$p(y|x) = \frac{p(x, y)}{p(x)}. \quad (\text{D.29})$$

同理，已知  $Y = y$  的条件下，随机变量  $X = x$  的**条件密度函数**为

$$p(x|y) = \frac{p(x, y)}{p(y)}. \quad (\text{D.30})$$

通过公式 (D.29) 和 (D.30)，我们可以得到两个条件概率  $p(y|x)$  和  $p(x|y)$  之间的关系。

$$p(y|x) = \frac{p(x|y)p(y)}{p(x)} \quad (\text{D.31})$$

$$= \frac{p(x|y)p(y)}{\sum_y p(x|y)p(y)}. \quad (\text{D.32})$$

这个公式称为**贝叶斯定理** (Bayes' theorem)。

### D.2.5 随机变量的独立性

对于离散随机向量  $(X, Y)$ ，如果其联合概率  $p(x_i, y_j)$  满足

$$p(x_i, y_j) = p(x_i)p(y_j), \quad i, j = 1, 2, \dots \quad (\text{D.33})$$

则称  $X$  和  $Y$  是相互独立的。

对于二维连续随机向量  $(X, Y)$ ，如果其联合分布概率密度函数  $p(x, y)$  满足

$$p(x, y) = p(x)p(y), \quad (\text{D.34})$$

则称  $X$  和  $Y$  是相互独立的。

### D.2.6 均值和方差

对于离散变量  $X$ ，取值为  $x_1, x_2, \dots$ ，对应的概率为  $p(x_1), p(x_2), \dots$ ，如果级数

$$\sum_{i=1}^{\infty} x_i p(x_i) \quad (\text{D.35})$$

绝对收敛，则把它称为  $X$  的数学期望或均值，记为  $\mathbb{E}[X]$ 。

如果  $\sum_{i=1}^{\infty} x_i p(x_i)$  发散时，则说  $X$  的均值不存在。

若  $\mathbb{E}[X - \mathbb{E}[X]]^2$  存在，则称它为随机变量  $X$  的方差，记为  $\mathbb{D}[X]$ ， $\sqrt{\mathbb{D}[X]}$  则称为  $X$  的根方差或标准差。

## D.3 随机过程

随机过程 (stochastic process) 是一组随机变量  $X_t$  的集合，其中  $t$  属于一个索引 (index) 集合  $\mathcal{T}$ 。索引集合  $\mathcal{T}$  可以定义在时间域或者空间域，但一般为时间域，以实数或正数表示。当  $t$  为实数时，随机过程为连续随机过程；当  $t$  为整数时，为离散随机过程。日常生活中的很多例子包括股票的波动、语音信号、身高的变化等都可以看作是随机过程。常见的和时间相关的随机过程模型包括贝努力过程、随机游走、马尔可夫过程等。和空间相关的随机过程通常称为随机场 (random field)。比如一张二维的图片，每个像素点 (变量) 通过空间的位置进行索引，这些像素就组成了一个随机过程。



### D.3.1 马尔可夫过程

**马尔可夫性质** 在随机过程中, 马尔可夫性质 (Markov property) 是指一个随机过程在给定现在状态及所有过去状态情况下, 其未来状态的条件概率分布仅依赖于当前状态。以离散随机过程为例, 假设随机变量  $X_0, X_1, \dots, X_T$  构成一个随机过程。这些随机变量的所有可能取值的集合被称为状态空间 (state space)。如果  $X_{t+1}$  对于过去状态的条件概率分布仅是  $X_t$  的一个函数, 则

$$P(X_{t+1} = x_{t+1} | X_{0:t} = x_{0:t}) = P(X_{t+1} = x_{t+1} | X_t = x_t), \quad (\text{D.36})$$

其中  $X_{0:t}$  表示变量集合  $X_0, X_1, \dots, X_t$ ,  $x_{0:t}$  为在状态空间中的状态序列。

马尔可夫性质也可以描述为给定当前状态时, 将来的状态与过去状态是条件独立的。

**马尔可夫链** 离散时间的马尔可夫过程也称为马尔可夫链 (Markov chain)。如果一个马尔可夫链的条件概率

$$P(X_{t+1} = s_i | X_t = s_j) = \mathbf{T}(s_i, s_j), \quad (\text{D.37})$$

在不同时间都是不变的, 即和时间  $t$  无关, 则称为时间同质的马尔可夫链 (time-homogeneous Markov chains)。如果状态空间是有限的,  $T(s_i, s_j)$  也可以用 一个矩阵  $T$  表示, 称为状态转移矩阵 (transition matrix), 其中元素  $t_{ij}$  表示状态  $s_i$  转移到状态  $s_j$  的概率。

**平稳分布** 假设状态空间大小为  $M$ , 向量  $\pi = [\pi_1, \dots, \pi_M]^T$  为状态空间中的一个分布, 满足  $0 \leq \pi_i \leq 1$  和  $\sum_{i=1}^M \pi_i = 1$ 。

对于状态转移矩阵为  $\mathbf{T}$  的时间同质的马尔可夫链, 如果存在一个分布  $\pi$  满足

$$\pi = \mathbf{T}\pi, \quad (\text{D.38})$$

即分布  $\pi$  就称为该马尔可夫链的平稳分布 (stationary distribution)。根据特征向量的定义可知,  $\pi$  为矩阵  $\mathbf{T}$  的 (归一化) 的对应特征值为 1 的特征向量。

如果一个马尔可夫链的状态转移矩阵  $\mathbf{T}$  满足所有状态可遍历性以及非周期性, 那么对于任意一个初始状态分布  $\pi^{(0)}$ , 将经过一定时间的状态转移之后, 都会收敛到平稳分布, 即

$$\pi = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathbf{T}^N \pi^{(0)}. \quad (\text{D.39})$$

**定理 D.1 – 细致平稳条件 (detailed balance condition):** 如果一个马尔科夫链满足

$$\pi_i t_{ij} = \pi_j t_{ji}, \quad (\text{D.40})$$

则一定会收敛到平稳分布  $\pi$ 。

即也就是从状态  $i$  转移到状态  $j$  的数量和从状态  $j$  转移到状态  $i$  的数量相一致，也就相互抵消，所以数量不发生改变。

细致平稳条件只是马尔科夫链收敛的充分条件，不是必要条件。

### D.3.2 高斯过程

高斯过程 (Gaussian process) 也是一种应用广泛的随机过程模型。假设有一组连续随机变量  $X_0, X_1, \dots, X_T$ ，如果由这组随机变量构成的任一有限集合

$$X_{t_1, \dots, t_k} = [X_{t_1}, \dots, X_{t_n}]^T$$

都服从一个多元正态分布，那么这组随机变量为一个随机过程。高斯过程也可以定义为：如果  $X_{t_1, \dots, t_n}$  的任一线性组合都服从一元正态分布，那么这组随机变量为一个随机过程。

**高斯过程回归** 高斯过程回归 (Gaussian process regression) 是利用高斯过程来对函数分布进行直接建模。和机器学习中参数化建模 (比如贝叶斯线性回归) 相比，高斯过程是一种非参数模型，可以拟合一个黑盒函数，也可以给出拟合结果的置信度 [Rasmussen, 2004]。

假设函数  $f(\mathbf{x})$  服从高斯过程，且为平滑函数，即如果两个样本点  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$  比较接近，那么对应的  $f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2)$  也比较接近。两个样本点的距离可以用核函数来定义。函数  $f(x)$  的有限采样点服从一个多元正态分布，即

$$[f(\mathbf{x}_1), f(\mathbf{x}_2), \dots, f(\mathbf{x}_n)]^T \sim \mathcal{N}\left(\mu(X), K(X, X)\right), \quad (\text{D.41})$$

其中  $X = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n]$ ， $\mu(X) = [\mu(\mathbf{x}_1), \mu(\mathbf{x}_2), \dots, \mu(\mathbf{x}_n)]^T$  是均值向量， $K(X, X) = [k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)]_{n \times n}$  是协方差矩阵， $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  为衡量两个输入距离的核

函数。一个常用的核函数是平方指数（squared exponential）函数

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2l^2}\right), \quad (\text{D.42})$$

其中  $l$  为超参数。当  $\mathbf{x}_i$  和  $\mathbf{x}_j$  越接近，其核函数的值越大，表明  $f(\mathbf{x}_i)$  和  $f(\mathbf{x}_j)$  越相关。

假设  $f(\mathbf{x})$  的一组带噪声的观测值为  $(\mathbf{x}_i, y_i)$   $1 \leq i \leq n$ ，其中

$$y_i \sim \mathcal{N}(f(\mathbf{x}_i), \sigma^2),$$

为正态分布， $\sigma$  为噪声方差。

对于一个新的样本点  $\mathbf{x}^*$ ， $f(\mathbf{x}^*)$  满足

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ f(\mathbf{x}^*) \end{bmatrix} \sim N\left(\begin{bmatrix} \mu(X) \\ \mu(\mathbf{x}^*) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} K(X, X) + \sigma^2 \mathbf{I} & K(\mathbf{x}^*, X)^\top \\ K(\mathbf{x}^*, X) & k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*) \end{bmatrix}\right), \quad (\text{D.43})$$

其中  $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]$ ， $K(\mathbf{x}^*, X) = [k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_1), \dots, k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}_n)]$ 。

根据上面的联合分布， $f(\mathbf{x}^*)$  的后验分布满足

$$f(\mathbf{x}^*)|X, \mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2), \quad (\text{D.44})$$

其中均值  $\hat{\mu}$  和方差  $\hat{\sigma}^2$  为

$$\hat{\mu} = K(\mathbf{x}^*, X)(K(X, X) + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{y} - \mu(X)) + \mu(\mathbf{x}^*), \quad (\text{D.45})$$

$$\hat{\sigma}^2 = k(\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*) - K(\mathbf{x}^*, X)(K(X, X) + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1}K(\mathbf{x}^*, X)^\top. \quad (\text{D.46})$$

从公式 (D.45) 可以看出，均值函数  $\mu(x)$  可以近似地互相抵消。在实际应用中，一般假设均值函数为 0，均值  $\hat{\mu}$  可以将简化为

$$\hat{\mu} = K(\mathbf{x}^*, X)(K(X, X) + \sigma^2 \mathbf{I})^{-1}\mathbf{y}. \quad (\text{D.47})$$

高斯过程回归可以认为是一种有效的贝叶斯优化方法，广泛地应用于机器学习。

在支持向量机中，平方指数核函数也叫高斯核函数或高斯。我们将 GP 的均值设置为 0——它们实际上已经足够强大，可以在不改变均值的情况下拟合各种函数。径向基函数。这里为了避免混淆，我们称为平方指数核函数。

## E 信息论

Claude Shannon, 1916年4月30日—2001年2月26日), 美国数学家、电子工程师和密码学家, 被誉为信息论的创始人。

信息论 (information theory) 是数学、物理、统计、计算机科学等多个学科的交叉领域。信息论是由 Claude Shannon 最早提出的, 主要研究信息的量化、存储和通信等方法。这里, “信息” 是指一组消息的集合。假设在一个噪声通道上发送消息, 我们需要考虑如何对每一个信息进行编码、传输以及解码, 使得接收者可以尽可能准确地重构出消息。

在机器学习相关领域, 信息论也有着大量的应用。比如特征抽取、统计推断、自然语言处理等。

### E.0.1 熵

熵 (Entropy) 最早是物理学的概念, 用于表示一个热力学系统的无序程度。在信息论中, 熵是对不确定性的测量。熵越高, 则能传输越多的信息, 熵越低, 则意味着传输的信息越少。

对于离散随机变量  $X$ , 假设其取值集合为  $\mathcal{X}$ , 概率分布为  $p(x) = P(X = x), x \in \mathcal{X}$ 。

$X$  的熵定义如下

$$H(X) = \mathbb{E}_X[I(x)] \quad (\text{E.1})$$

$$= \mathbb{E}_X[-\log(p(x))] \quad (\text{E.2})$$

$$= -\sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log p(x), \quad (\text{E.3})$$

这里,  $I(X)$  是  $X$  的信息量 (又称为自信息)。当  $p(x_i) = 0$  时, 我们定义

$$0 \log 0 = 0 \quad (\text{E.4})$$

在熵的定义中, 对数的底可以使用2、自然常数  $e$ , 或是10。

这与极限一致,  $\lim_{p \rightarrow 0^+} p \log p = 0$ 。

如果变量  $X$  当且仅当在  $x$  时  $p(x) = 1$ , 则熵为0; 如果其概率分布为一个均匀分布, 则熵最大。也就是说, 对于一个确定的信息, 其熵为0, 信息量也为0。在这里, 熵可以用来衡量信息量, 也就是需要多少信息才能消除对信息源的不确定性。

对于两个离散随机变量  $X$  和  $Y$ , 假设  $X$  取值集合为  $\mathcal{X}$ ;  $Y$  取值集合为  $\mathcal{Y}$ , 其联合概率分布满足为  $p(x, y)$ , 则

$X$  和  $Y$  的联合熵 (Joint Entropy) 为

$$H(X, Y) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log p(x, y). \quad (\text{E.5})$$

$X$  和  $Y$  的条件熵 (Conditional Entropy) 为

$$H(X|Y) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log p(x|y) \quad (\text{E.6})$$

$$= - \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(y)}. \quad (\text{E.7})$$

根据其定义, 条件熵也可以写为

$$H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y). \quad (\text{E.8})$$

## E.1 互信息

互信息 (Mutual Information) 是衡量已知一个变量时, 另一个变量不确定性的减少程度。两个离散随机变量  $X$  和  $Y$  的互信息定义为

$$I(X; Y) = \mathbb{E}_{X, Y}[SI(x, y)] = - \sum_{x \in \mathcal{X}} \sum_{y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)}, \quad (\text{E.9})$$

其中,  $SI(x, y)$  是逐点互信息 (Pointwise Mutual Information)。

互信息的一个性质为

$$I(X; Y) = H(X) - H(X|Y) \quad (\text{E.10})$$

$$= H(Y) - H(Y|X) \quad (\text{E.11})$$

由定义可以看出, 如果  $X$  和  $Y$  相互独立, 即  $X$  不对  $Y$  提供任何信息, 反之亦然, 所以它们的互信息为零。

## E.2 KL 散度和交叉熵

**KL 散度** (Kullback-Leibler Divergence), 也叫 **KL 距离** 或 **相对熵** (Relative Entropy), 是衡量两个概率分布之间的距离。对于离散概率分布  $p$  和  $q$ , 从  $q$  到  $p$  的 KL 散度定义为

$$D_{\text{KL}}(p||q) = \sum_x p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)}. \quad (\text{E.12})$$

同样, 为了保证连续性, 定义  $0 \log \frac{0}{0} = 0, 0 \log \frac{0}{q} = 0$ 。

KL 散度可以看作用概率分布  $q$  来近似  $p$  时所造成的信息损失量。即按照概率分布  $q$  的最优编码对真实分布为  $p$  的信息进行编码, 其平均编码长度和  $p$  的最优平均编码之间的差异。

KL 散度总是非负的,  $D_{\text{KL}}(p||q) \geq 0$ 。只有当  $p = q$  时,  $D_{\text{KL}}(p||q) = 0$ 。如果两个分布越接近, KL 散度越小; 如果两个分布越远, KL 散度就越大。

公式 (E.12) 可以写为

$$D_{\text{KL}}(p||q) = - \sum_x p(x) \log q(x) + \sum_x p(x) \log p(x) \quad (\text{E.13})$$

$$= H(p, q) - H(p), \quad (\text{E.14})$$

其中,  $H(p)$  表示  $p$  的最优编码长度,  $H(p, q)$  为 **交叉熵** (Cross Entropy), 是按照概率分布  $q$  的最优编码对真实分布为  $p$  的信息进行编码的长度, 定义为

$$H(p, q) = \mathbb{E}_p[-\log q(x)] \quad (\text{E.15})$$

$$= - \sum_x p(x) \log q(x) \quad (\text{E.16})$$

$$= H(p) + D_{\text{KL}}(p||q). \quad (\text{E.17})$$

在给定  $p$  的情况下, 如果  $q$  和  $p$  越接近, 交叉熵越小; 如果  $q$  和  $p$  越远, 交叉熵就越大。

**习题 E-1** 证明公式 (D.44)。

## 参考文献

- Stephen Boyd and Lieven Vandenberghe. *Convex optimization*. Cambridge university press, 2004.
- Jorge Nocedal and Stephen Wright. *Numerical optimization*. Springer Science & Business Media, 2006.
- Carl Edward Rasmussen. Gaussian processes in machine learning. In *Advanced lectures on machine learning*, pages 63–71. Springer, 2004.