

14

Sequences

数列

也是一种特殊函数



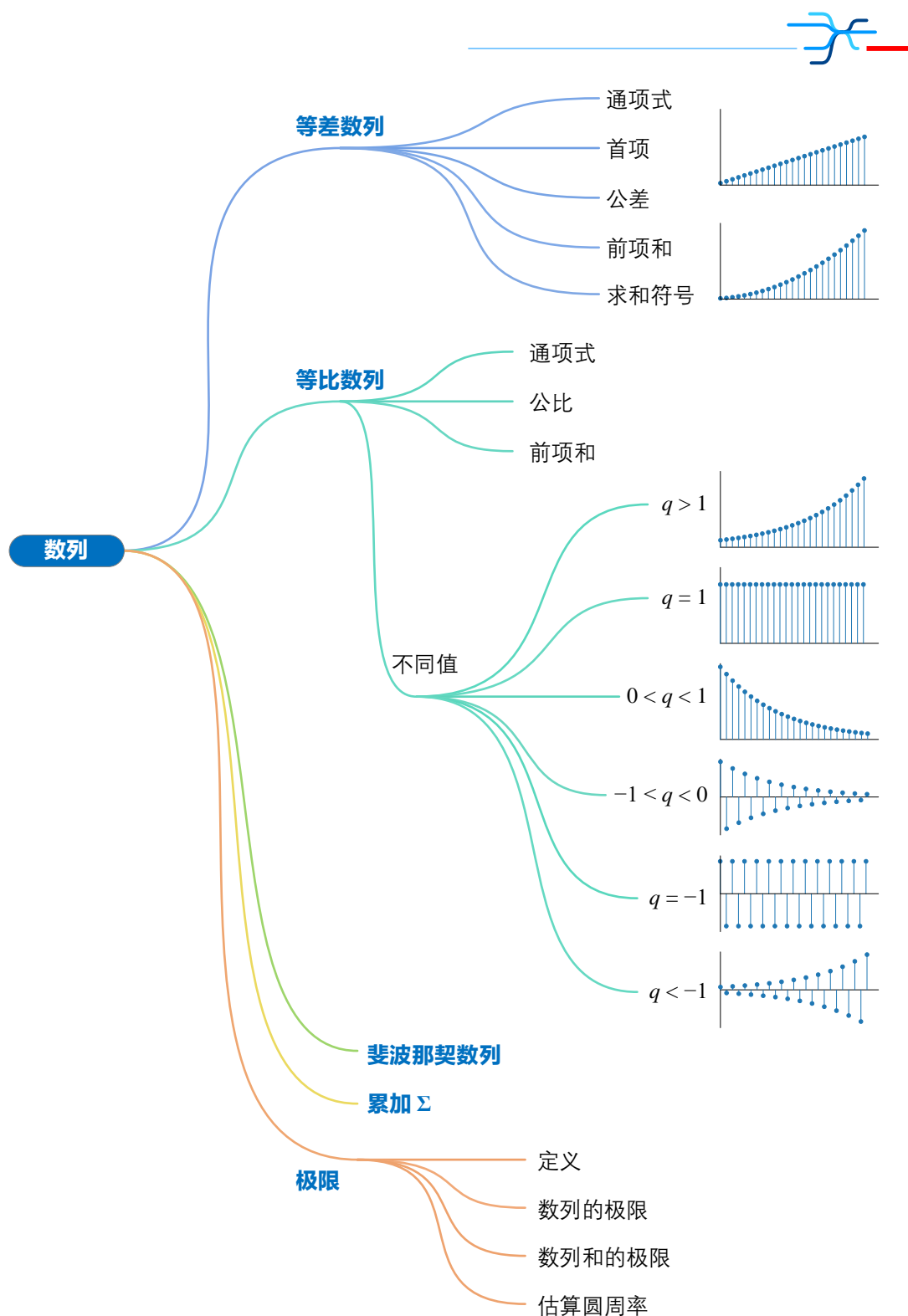
有数字的地方，就存在美。

Wherever there is number, there is beauty.

—— 普罗克洛 (Proclus) | 古希腊哲学家 | 412 ~ 485



- ▶ `numpy.sum()` 计算数列和
- ▶ `numpy.cumsum()` 计算累积和
- ▶ `numpy.cumprod()` 计算累积乘积
- ▶ `numpy.arange()` 根据指定的范围以及设定的步长，生成一个等差数列，数据类型为数组
- ▶ `matplotlib.pyplot.stem()` 绘制火柴梗图



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

14.1 芝诺悖论：阿基里斯追不上乌龟

芝诺悖论 (Zeno's paradoxes) 中最有名的例子莫过于“阿基里斯追乌龟”。

阿基里斯 (Achilles) 是古希腊神话中的勇士，可谓飞毛腿。而乌龟的奔跑速度仅仅是阿基里斯的 $1/10$ 。赛跑比赛时，阿基里斯让乌龟在自己前面 100 米处起跑，他自己在后面追。

根据芝诺悖论，阿基里斯不可能追上乌龟。

芝诺的逻辑是这样的，赛跑过程中，阿基里斯必须先追到 100 米处，而此时乌龟已经向前爬行了 10 米。此时，相当于乌龟还是领先阿基里斯 10 米，这算是一个新的起跑点。

阿基里斯继续追乌龟，当他跑了 10 米之后，乌龟则又向前爬了 1 米。

于是，阿基里斯还需要再追上 1 米，于此同时乌龟又向前爬了 $1/10$ 米。

如此往复，结论是阿基里斯永远也追不上乌龟。

为了方便可视化，假设乌龟爬行速度是阿基里斯奔跑速度的 $1/2$ 。设定，阿基里斯奔跑速度 10 m/s，神龟爬（飞）行速度 5 m/s。

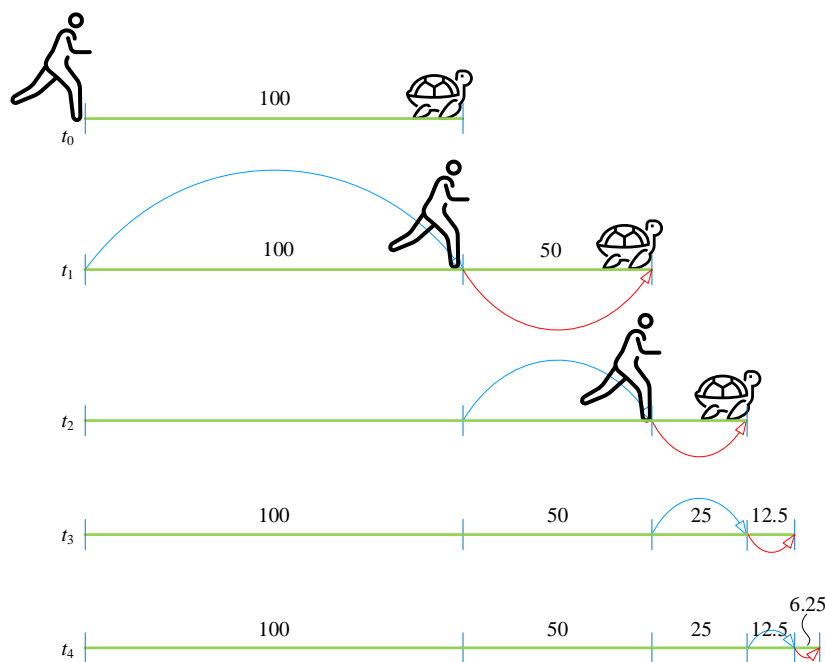


图 1. 阿基里斯追乌龟

$t_0 = 0$ s 时刻，乌龟在阿基里斯前方 100 米处，两者同时起跑。

$t_1 = 10$ s, 阿基里斯跑了 10 s, 追到 100 m; 而这段时间, 乌龟向前跑了 50 m。因此, 此刻乌龟领先优势为 50 m。

$t_2 = 10 + 5$ s, 阿基里斯又跑了 5 s, 又追了 50 m。5 s 时间, 乌龟跑了 25 m, 而此时乌龟领先优势为 25 m。

$t_3 = 10 + 5 + 2.5$ s, 阿基里斯又跑了 2.5 s, 再追了 25 m。此刻乌龟领先优势为 12.5 m。

$t_4 = 10 + 5 + 2.5 + 1.25$ s, 阿基里斯再追了 12.5 m, 此刻乌龟领先优势为 6.25 m。

时间无限可分, 距离无限可分, 上述过程无穷尽也, 似乎阿基里斯永远也追不上乌龟。

同向追赶问题

看到这里, 大家一定会有不同意见。

这分明就是一道小学算数的“同向追赶问题”, 距离之差 (100 m) 除以速度之差 (5 m/s) 就等于阿基里斯追上乌龟所需要的时间为 20 s。而 20 s 时间, 阿基里斯一共跑了 200 m。

这种解题思路固然正确。但是, 解题过程的前提条件是, 假设阿基里斯恰好追上了乌龟!

解题技巧当然重要。实际上, 看似无比荒诞的阿基里斯追乌龟问题, 其中蕴含的数学思想才是内核。

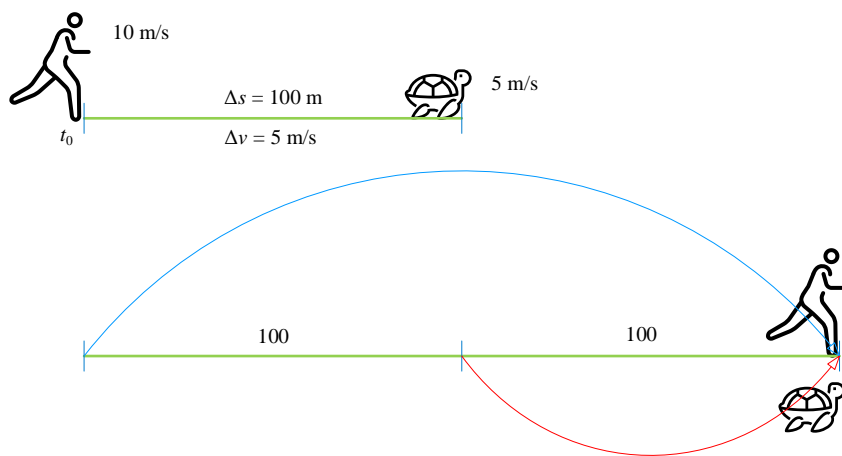


图 2. 小学数学同向追赶问题

一尺之棰，日取其半，万世不竭

下面用数列这个数学工具来分析上述问题。**数列** (sequence) 是指按照一定规则排列的一列数。

将图 1 中每段时间间隔写成一个数列：

$$10, 5, 2.5, 1.25, 0.625, 0.3125, 0.15625, 0.078125, \dots \quad (1)$$

图 3 (a) 用火柴梗图可视化 (1) 数列。

追赶时间的逐项和也写成一个数列累加：

$$10, 15, 17.5, 18.75, 19.375, 19.6875, 19.84375, 19.921875, \dots \quad (2)$$

图 3 (b) 所示火柴梗图为 (2) 数列。可以发现上述数列似乎逐渐趋向于 20，即阿基里斯追上乌龟所需要的时间。

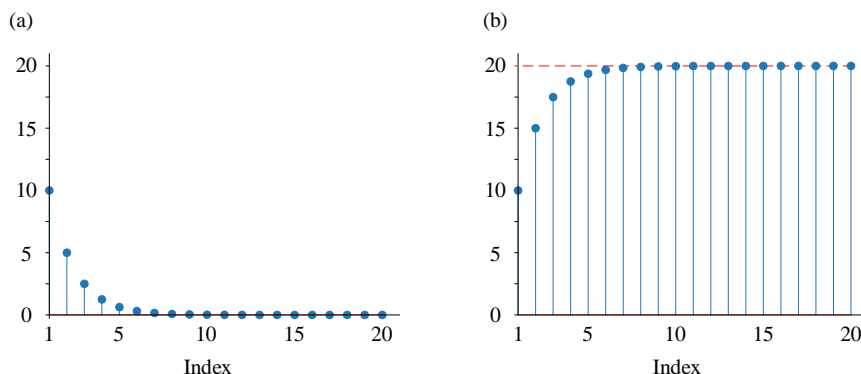


图 3. 时间间隔数列和时间逐项和数列

将阿基里斯在不同时刻之间奔跑的距离写成一列数：

$$100, 50, 25, 12.5, 6.25, 3.125, 1.5625, 0.78125, \dots \quad (3)$$

容易发现，这个数列就是大家熟悉的等比数列。上述数列的逐项和构成了一个新数列：

$$100, 150, 175, 187.5, 193.75, 196.875, 198.4375, 199.21875, \dots \quad (4)$$

可以发现上述数列似乎逐渐趋向于 200，即阿基里斯追上乌龟总共奔跑的距离。

这体现的正是庄子的哲学观点——“一尺之棰，日取其半，万世不竭。”如图 4 所示，面积为 1 的正方形，每次取一半，如此往复，没有尽头。

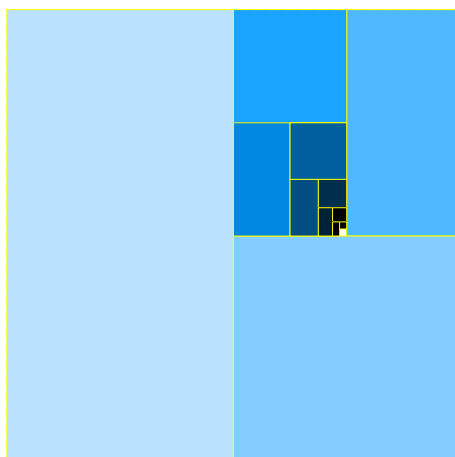


图 4. 日取其半，万世不竭

大家经常会遇到类似比较 1 和 $0.99999\dots$ 大小之类的数学问题，其中蕴含的数学思想就是极限。本章就讲解数列、数列前 n 项和、极限等数学工具。

14.2 数列分类

几种常见的数列：

- ◀ **等差数列** (arithmetic sequence 或 arithmetic progression)，图 5 (a) 为递增等差数列，图 5 (b) 为递减等差数列；
- ◀ **等比数列** (geometric sequence 或 geometric progression)，图 5 (c) 为递增等比数列，图 5 (d) 为递减等比数列；
- ◀ **正负相间数列** (sign sequence 或 bipolar sequence)，如图 5 (e) 和 (f) 所示；
- ◀ **斐波那契数列** (Fibonacci sequence)，如图 5 (g) 所示；
- ◀ **随机数列** (random sequence)，如图 5 (h) 所示。

此外，根据数列项的数量，数列可以分为**有限项数列** (finite sequence) 和**无限项数列** (infinite sequence)。

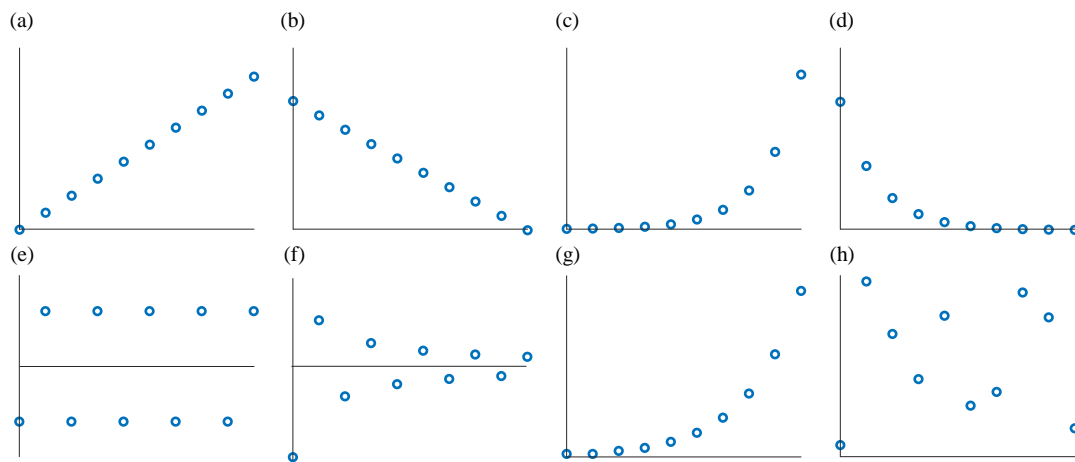


图 5. 几种数列

14.3 等差数列：相邻两项差相等

等差数列指的是数列中任何相邻两项的差相等，比如 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, ...

等差数列中相邻两项差值常被称作**公差** (common difference)。将数列的第 k 项用一个具体含有参数 k 式子表示出来，称作该数列的通项公式。

等差数列通项公式 a_k 的一般式如下：

$$a_k = a + (k-1) \cdot d \quad (5)$$

a_1 (读作 a sub one) 为数列第一项，即**首项** (initial term) $a_1 = a$ ； d 为公差； k 为**项数** (number of terms)。`numpy.arange()` 和 `numpy.linspace()` 可以用来生成等差数列。

(5) 所示等差数列前 k 项之和为 S_k ：

$$\begin{aligned} S_k &= a + (a+d) + (a+2d) + \dots + (a+(k-1) \cdot d) \\ &= \sum_{i=1}^k (a + (i-1) \cdot d) = a \cdot k + \frac{k(k-1)}{2} \cdot d \end{aligned} \quad (6)$$

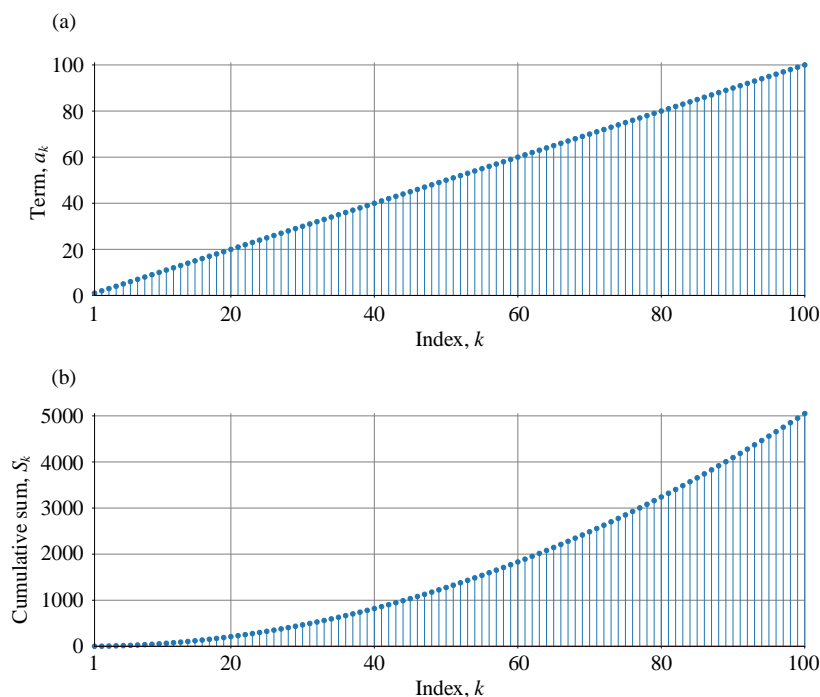
上式中， i 为**索引** (index) 也叫序号； Σ 是求和符号，是希腊字母 σ 的大写，读作 sigma。`numpy.sum()` 可以用来计算数列和。注意区分， Π 是求积符号，它是希腊字母 π 的大写。

欧拉 (Leonhard Euler) 最先使用 Σ 来表达求和。

相信读者还记得，等差数列求和的计算方法——首项加末项之和，乘以项数，然后除 2。相传，这个等差数列求和方法是**高斯** (Johann Carl Friedrich Gauss) 年仅 10 岁的时候发现的。

本书前文介绍，给定一列数，除了求和之外，还有**累计求和** (cumulative sum)。比如，等差数列 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 的累积和为 1, 2 (1+2), 6 (1+2+3), 10 (1+2+3+4), 15, 21, 28, 36, 45, 55。累积和的最后一项也是数列之和。`numpy.cumsum()` 可以用来计算数列累计求和。

下面，我们编写一段 Python 代码，计算等差数列 1, 2, 3, 4, 5, ..., 99, 100 之和，以及数列累积和。并绘制图 6 两图；图 6 (a) 为 a_k 随序数变化，图 6 (b) 为 S_k 和随序数变化。

图 6. 等差数列 $1, 2, 3, 4, 5, \dots, 99, 100$ 和数列累积和

函数视角

从函数角度，数列也是函数， k 为自变量， a_k 为因变量。需要特殊强调的是 k 的取值为正整数。如图 6 (a) 所示，(5) 可以看做特殊的一次函数。

也从函数角度来看，(6) 中 k 为自变量、取值同样为正整数， S_k 为因变量。如图 6 (b) 所示，(6) 可以看做特殊的二次函数。

数列作为一种特殊的函数，也具有各种函数性质。

$d > 0$ ，如图 5 (a) 所示数列 a_k 递增； $d < 0$ ，如图 5 (c) 所示数列 a_k 递减。

$d > 0$ ，如图 5 (b) 所示 S_k 图像开口向上，呈现出凸性； $d < 0$ ，数列递减，如图 5 (b) 所示 S_k 图像开口向下，呈现出凹性。

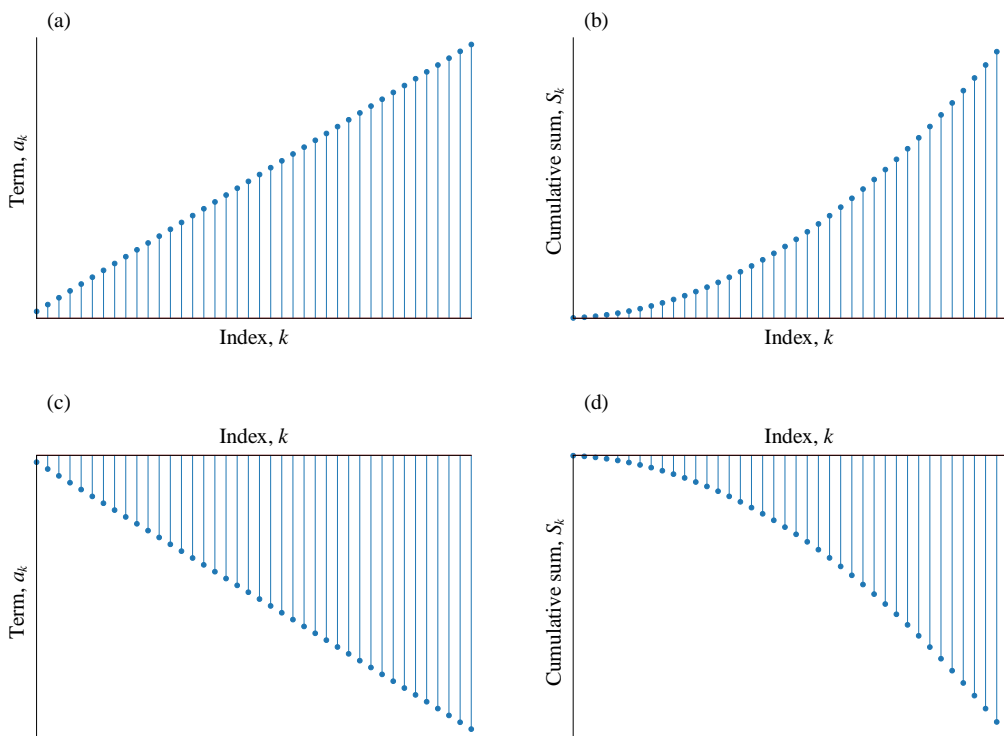


图 7. 公差为正、负两种情况

表 1. 数列英文表达

数学表达	英文表达
$a_n + a_{n-1} + \cdots + a_1 + a_0$	a sub n plus a sub n minus one plus dot dot dot plus a sub one plus a sub zero. a sub n plus a sub n minus one plus ellipsis plus a sub one plus a sub zero.
$a_n \cdot a_{n-1} \cdots a_1 \cdot a_0$	a sub n times a sub n times one plus dot dot dot times a sub one times a sub zero.
$a_0 + x(a_1 + x(a_2 + \cdots))$	a sub zero plus x times quantity of a sub one plus x times quantity of a sub two plus dot dot dot
$(a_n - a_{n-1})^2$	a sub n minus a sub quantity n minus one all squared.



Bk3_Ch14_01.py 计算并绘制图 6。

14.4 等比数列：相邻两项比值相等

等比数列指的是数列中任何相邻两项比值相等，比如 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, ...

等比数列的比值被称作为**公比** (common ratio)。等比数列第 k 项 a_k 的一般式如下：

$$a_k = aq^{k-1} = \frac{a}{q} q^k \quad (7)$$

其中, a 为首项, q 为公比。注意 q 不为 0。

从函数角度, (7) 为特殊的指数函数—— q 为底数, 自变量 k 为指数, k 的取值范围为正整数。

(7) 所示等比数列前 k 项之和 S_k 为:

$$\begin{aligned} S_k &= a + aq + aq^2 + aq^3 + \cdots + aq^{k-1} \\ &= \sum_{i=0}^{k-1} a \cdot q^i = \frac{a(q^k - 1)}{(q - 1)} = \frac{a}{q - 1} q^k - \frac{a}{q - 1} \end{aligned} \quad (8)$$

注意, q 不为 1。从函数角度, (7) 也是指数函数。

请大家回忆等比数列求和技巧。首先, 计算 S_k 和 q 乘积:

$$S_k q = aq + aq^2 + aq^3 + \cdots + aq^{k-1} + aq^k \quad (9)$$

(9) 和 (8) 等式左右分别相减, 并整理得到 S_k :

$$\begin{aligned} S_k q - S_k &= S_k (q - 1) = aq^k - a = a(q^k - 1) \\ \Rightarrow S_k &= \frac{a(q^k - 1)}{(q - 1)} \end{aligned} \quad (10)$$

函数视角

图 8 展示六种等比 q 取不同值时, 等比数列的特点。

当 $q > 1$ 时, 等比数列呈现出**指数增长** (exponential growth), 如图 8 (a) 所示。

当 $q = 1$ 时, 等比数列蜕化成常数数列, 如图 8 (b) 所示。

当 $0 < q < 1$ 时, 等比数列呈现出**衰退** (decay), 如图 8 (c) 所示。

当 $-1 < q < 0$ 时, 等比数列呈现两种特性: **振荡** (oscillate) 和**收敛** (converge), 如图 8 (d) 所示。

当 $q = -1$ 时, 等比数列只是反复振荡, 也就是正负相间数列, 如图 8 (e) 所示。

当 $q < -1$ 时, 等比数列振荡**发散** (diverge), 如图 8 (e) 所示。

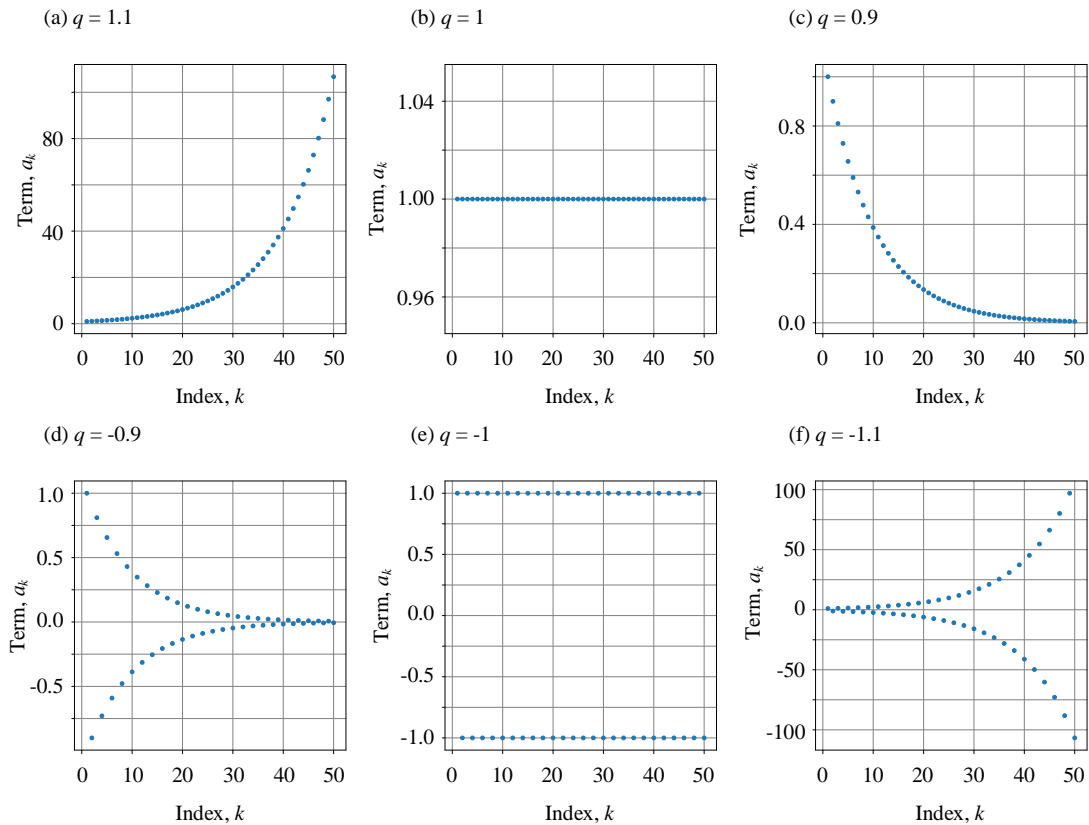


图 8. 六种等比数列趋势



Bk3_Ch14_02.py 绘制图 8 几幅子图。



在 Bk3_Ch14_02.py 基础上, 我们做了一个 App 用来交互呈现 q 对数列的影响。并采用 Plotly 呈现交互散点图像。请参考 Streamlit_Bk3_Ch13_01.py。



数列在大数据和机器学习有着广泛应用, 下面举一个例子介绍等比数列在指数加权移动平均 EWMA (Exponentially Weighted Moving Average) 方法的应用。

一般情况, 求解平均值 SA (Simple Average) 时, 对不同时间点的观察值赋予相同的权重, 如下式:

$$SA = \frac{1}{n}(s_1 + s_2 + s_3 + \dots + s_n) \quad (11)$$

其中，所有观察值中 s_1 为最旧的数据， s_n 为最新数据。

采用 EWMA 可以保证越新的观察值享有越高的权重，这样估算得到的平均值能够反映数据近期趋势：

$$EWMA = \frac{(1-\lambda)}{1-\lambda^n}(\lambda^{n-1}s_1 + \lambda^{n-2}s_2 + \lambda^{n-3}s_3 + \dots + \lambda^0s_n) \quad (12)$$

(12) 中的 λ 为 **衰减系数** (decay factor)，取值范围在 0 ~ 1 之间。 λ 越小，衰减越明显。

可以发现索引为 i 的权重 w_i 计算式如下所示：

$$w_i = \frac{(1-\lambda)}{1-\lambda^n} \lambda^{n-i} \quad (13)$$

索引连续变化时，权重 w_i 便构成一个等比数列。图 9 所示为 EWMA 权重随衰减系数变化情况。

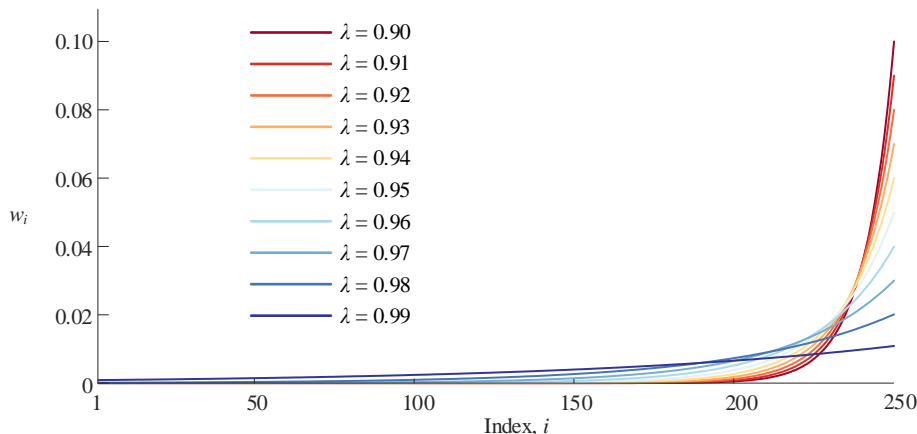


图 9. EWMA 权重随衰减系数变化

EWMA 权重一个重要的性质是，所有权重之和为 1，也就是，

$$\sum_{i=1}^n w_i = \frac{(1-\lambda)}{1-\lambda^n}(\lambda^{n-1} + \lambda^{n-2} + \lambda^{n-3} + \dots + \lambda^0) = 1 \quad (14)$$

更多有关时间序列、移动平均 MA、EWMA 方法及其应用，请读者阅读本系列丛书《数据科学》一册。

14.5 斐波那契数列

本书前文介绍过斐波那契数列和杨辉三角的关系。[斐波那契数列](#) (Fibonacci sequence)，又被称作黄金分割数列。

斐波那契数列可以通过如下[递归](#) (recursion) 方法获得：

$$\begin{cases} F_0 = 0 \\ F_1 = F_2 = 1 \\ F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, \quad n > 2 \end{cases} \quad (15)$$

于是，包括第 0 项，斐波那契数列的前 10 项为：

$$0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55 \quad (16)$$



Bk3_Ch14_03.py 产生并打印斐波那契数列。

黄金分割

斐波那契数列和[黄金分割](#) (golden ratio) 有着密切联系。图 10 所示为利用斐波那契数列构造的矩形，这个矩形是对黄金分割矩形的近似。黄金矩形的长宽比例 φ 为：

$$\varphi = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1.61803 \quad (17)$$

图 10 所示矩形的长宽比例为：

$$\frac{21+13}{21} \approx 1.61905 \quad (18)$$

图 10 所示的螺旋线叫做[斐波那契螺旋线](#) (Fibonacci spiral)，它是对[黄金螺旋线](#) (golden spiral) 的近似。

本系列丛书将在《矩阵力量》一本介绍如何用[特征值分解](#) (eigen decomposition) 求解斐波那契数列通项式。

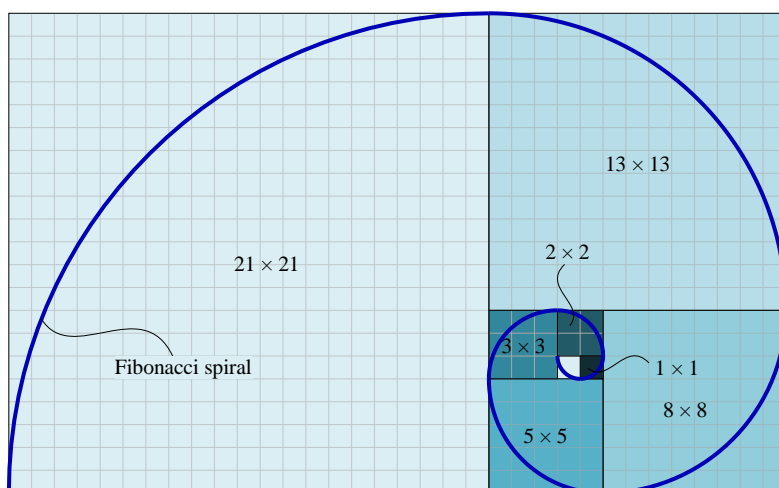


图 10. 斐波那契数列和黄金分割关系

14.6 累加：大写西格玛

求和符号 (summation symbol) —— 大写西格玛 Σ (capital sigma) —— 是表达求和的便捷记法。

以下式为例， a_i 描述求和中的每一项，下角标 i 代表**索引** (index variable 或 index)，也叫序号：

$$\sum_{i=1}^n a_i = a_1 + a_2 + \cdots + a_{n-1} + a_n \quad (19)$$

Σ 下侧和上侧的数字分别代表了**求和索引下限** (lower bound of summation) 和**求和索引上限** (upper bound of summation)，如图 11 所示。

$$\begin{array}{lcl} \text{Upper limit (sum ends} & \text{--- } n & \text{Term} \\ \text{with this number)} & & | \\ \text{Summation symbol} & \text{--- } \Sigma & a_i \\ \text{Lower limit (sum starts} & \text{--- } i=1 & | \\ \text{with this number)} & & \text{Index of summation} \end{array}$$

图 11. 大西格玛求和记号

常用表达索引的字母有 i 、 j 、 k 、 m 、 n 等，采用什么索引字母并不影响求和结果，比如：

$$\sum_{i=1}^{100} a_i = \sum_{j=1}^{100} a_j = \sum_{k=1}^{100} a_k \quad (20)$$

Σ 中索引上下限可以都是具体正整数，比如：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\sum_{i=1}^5 a_i = a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 \quad (21)$$

Σ 中索引上下限也可以都是代数符号，比如：

$$\sum_{i=m}^n a_i = a_m + a_{m+1} + \cdots + a_{n-1} + a_n \quad (22)$$

Σ 的索引也可以是满足集合运算的标签：

$$\sum_{i \in S} a_i \quad (23)$$

降维

如图 12 所示，当索引 i 在一定范围变化时，比如 $1 \sim n$ ，数列 $\{a_i\}$ ($i = 1 \sim n$) 本身相当于一个数组，而索引 i 像是方向。

对 $\{a_i\}$ ($i = 1 \sim n$) 求和，相当于在 i 方向上将数组“压扁”，得到一个标量 $\sum_i a_i$ 。 $\sum_i a_i$ 除以 n (也就是数列元素个数)，便得到平均数。

从空间角度来看，数列 $\{a_i\}$ 是一维数组，索引 i 就是它的维度。而求和运算 $\sum_i a_i$ 相当于“降维”，得到的“和”只是一个数值，没有维度。

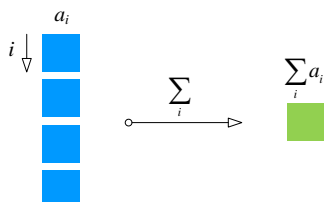


图 12. 从数组角度看求和

线性代数运算

看到这里，大家是否想得到，此处图 12 数列 $\{a_i\}$ 相当于一个列向量 \mathbf{a} ，即：

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad (24)$$

本书前文在讲解向量和矩阵时提到过，对列向量 \mathbf{a} 所有元素求和可以利用如下向量内积或矩阵运算得到，

$$\sum_{i=1}^n a_i = \mathbf{1} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{1} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \mathbf{a}^T \mathbf{1} = \mathbf{1}^T \mathbf{a} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad (25)$$

其中， $\mathbf{1}$ 就是全 1 列向量，和 \mathbf{a} 等长。

这样，我们就把数列求和、向量、向量内积、矩阵乘法这几个概念联系起来。

$$\mathbf{1} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{1} = \mathbf{1}^T \mathbf{a} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} @ \mathbf{a} = \mathbf{a}^T @ \mathbf{1} = \sum_i a_i$$

图 13. 从向量内积和矩阵乘法角度看求和

下面介绍几个有关求和符号的重要法则。

对数运算把连乘变连加

类似 Σ , Π (capital pi) 用来标记多项相乘，比如：

$$\prod_{i=1}^n a_i = a_1 a_2 \cdots a_{n-1} a_n \quad (26)$$

本书前文提到，对数运算将连乘转化为连加，比如：

$$\ln \left(\prod_{i=1}^n a_i \right) = \ln a_1 + \ln a_2 + \cdots + \ln a_{n-1} + \ln a_n = \sum_{i=1}^n \ln a_i \quad (27)$$

乘系数

常数 c 乘 a_i ，再求和 $\sum_{i=1}^n c a_i$ ，等同于常数 c 乘 $\sum_{i=1}^n a_i$ ：

$$\sum_{i=1}^n c a_i = c \left(\sum_{i=1}^n a_i \right) = c \sum_{i=1}^n a_i \quad (28)$$

其中， $c \times$ 相当于“缩放”， \sum 相当于“降维”。如图 14 所示，(28) 相当于在说，“缩放 \rightarrow 降维”等价于“降维 \rightarrow 缩放”。

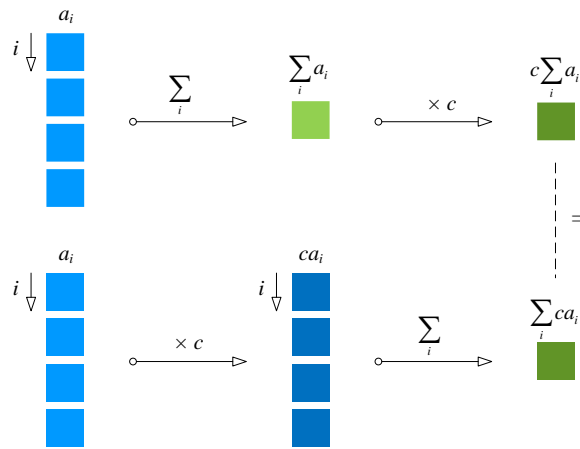


图 14. 乘系数

特别地，如果 Σ 内为一常数 a ，则，

$$\sum_{i=1}^n a = na \quad (29)$$

分段求和

可以根据索引排列，将求和分割成几个部分分别求和，比如：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n a_i &= (a_1 + a_2 + \cdots + a_k) + (a_{k+1} + a_{k+2} + \cdots + a_n) \\ &= \sum_{i=1}^k a_i + \sum_{i=k+1}^n a_i \end{aligned} \quad (30)$$

分段求和常用在对齐不同长度数组，以便化简计算。

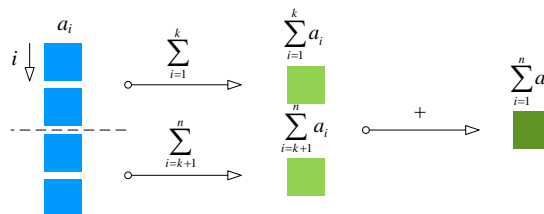


图 15. 分段求和

两项相加减

拥有相同索引的两项相加再求和，等于分别求和再相加，即，

$$\sum_{i=1}^n (a_i + b_i) = \sum_{i=1}^n a_i + \sum_{i=1}^n b_i \quad (31)$$

上述法则也适用于减法，即，

$$\sum_{i=1}^n (a_i - b_i) = \sum_{i=1}^n a_i - \sum_{i=1}^n b_i \quad (32)$$

平方

Σ 内为 a_i 的平方，则，

$$\sum_{i=1}^n (a_i^2) = \sum_{i=1}^n a_i^2 = a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + \cdots a_n^2 \quad (33)$$

如图 16 所示，利用前文 (24) 定义的列向量 \mathbf{a} ，(33) 等价于：

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{a} \quad (34)$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}^T @ \mathbf{a} = \sum_{i=1}^n a_i^2$$

图 16. 从向量内积和矩阵乘法角度看 $\sum_{i=1}^n a_i^2$

$\sum_{i=1}^n a_i$ 的平方则为：

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i \right)^2 = (a_1 + a_2 + a_3 + \cdots a_n)^2 \quad (35)$$

显然，(33) 和 (35) 不相同：

$$\sum_{i=1}^n (a_i^2) \neq \left(\sum_{i=1}^n a_i \right)^2 \quad (36)$$

乘法

拥有相同索引的 a_i 和 b_i 相乘，再求和：

$$\sum_{i=1}^n (a_i b_i) = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + \cdots + a_n b_n \quad (37)$$

定义列向量 \mathbf{b} ， \mathbf{b} 和 \mathbf{a} 形状相同， \mathbf{b} 的元素为 b_i 。如图 17 所示， $\sum_{i=1}^n (a_i b_i)$ 等价于：

$$\sum_{i=1}^n (a_i b_i) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{b} = \mathbf{b}^T \mathbf{a} \quad (38)$$

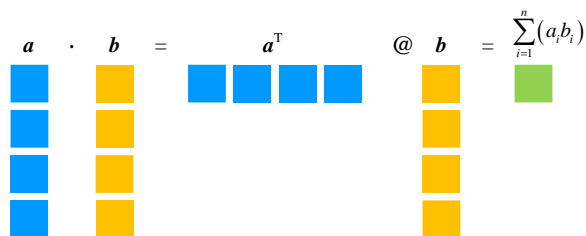


图 17. 从向量内积和矩阵乘法角度看 $\sum_{i=1}^n (a_i b_i)$

$\sum_{i=1}^n a_i$ 和 $\sum_{i=1}^n b_i$ 相乘展开得到：

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i \right) = \sum_{i=1}^n a_i \sum_{i=1}^n b_i = (a_1 + a_2 + \cdots + a_n)(b_1 + b_2 + \cdots + b_n) \quad (39)$$

显然，(37) 和 (39) 不相同：

$$\sum_{i=1}^n (a_i b_i) \neq \left(\sum_{i=1}^n a_i \right) \left(\sum_{i=1}^n b_i \right) \quad (40)$$

二重求和

一些情况，我们需要用到二重求和记号 $\Sigma\Sigma$ ，比如：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=2}^4 a_i b_j &= \sum_{i=1}^3 a_i b_2 + a_i b_3 + a_i b_4 \\ &= (a_1 b_2 + a_1 b_3 + a_1 b_4) + (a_2 b_2 + a_2 b_3 + a_2 b_4) + (a_3 b_2 + a_3 b_3 + a_3 b_4) \end{aligned} \quad (41)$$

注意，式中内层 Σ 索引为 j ，外层 Σ 索引为 i 。先对索引 j 求和，再对索引 i 求和。

注意上式中，每个元素只有一个索引，相当于只有一个维度。

两个索引

实践中，经常遇到的情况时一项有两个、甚至更多索引，比如 a_{ij} 有两个索引 i 和 j 。

根据本节前文分析思路，举个例子，索引 i 的取值范围为 $1 \sim n$ ，索引 j 的取值范围为 $1 \sim m$ ，数组 a_{ij} 相当于有 i 和 j 两个维度。

这是否让大家想到了本书前文讲过的矩阵，如图 18 所示， a_{ij} 相当于矩阵 A 的第 i 行、第 j 列元素。

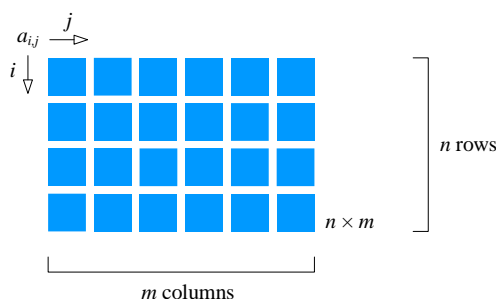


图 18. $n \times m$ 矩阵 A

本节后续内容就围绕图 19 热图给出的二维数组展开，这个数组有 8 行、12 列。

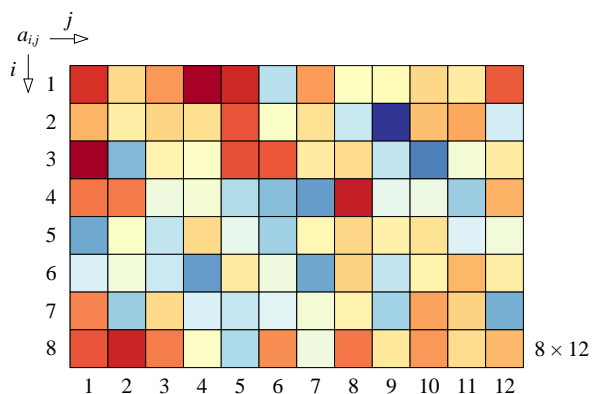


图 19. 8×12 数组

偏求和

下面先介绍单维求和，也就是沿着一个索引求和。我们给它取个名字，叫“偏求和”。这个“偏”字呼应本书第 16、18 章要介绍的“偏导数”、“偏微分”、“偏积分”等概念。

首先聊聊 $a_{i,j}$ 对索引 i 偏求和：

$$\sum_{i=1}^n a_{i,j} \Rightarrow \sum_{i=1}^n a_{i,1}, \sum_{i=1}^n a_{i,2}, \dots, \sum_{i=1}^n a_{i,m} \quad (42)$$

Sum over i

我们发现，得到的不是一个求和，而是 m 个和。也就是说，图 18 中每一列数值求和，每一列都有一个“偏求和”结果。

白话说， $a_{i,j}$ 就是个“表格”， $\sum_i a_{i,j}$ 就是按列求和，每列一个和。

如图 20 所示， $\sum_{i=1}^n a_{i,7}$ 代表对数组第 7 列元素求和。注意，为了简化数学表达，我们也常用 $\sum_i a_{i,j}$ 代表对索引 i 的求和，求和上下限不再给出。

$\sum_i a_{i,j}$ 除以 n ，得到的就是每一列元素的平均数。

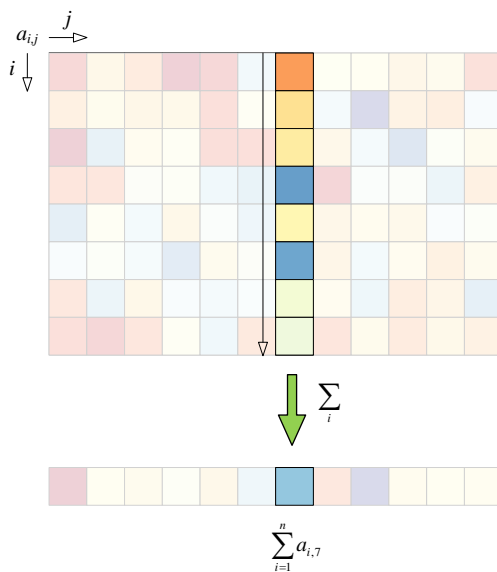
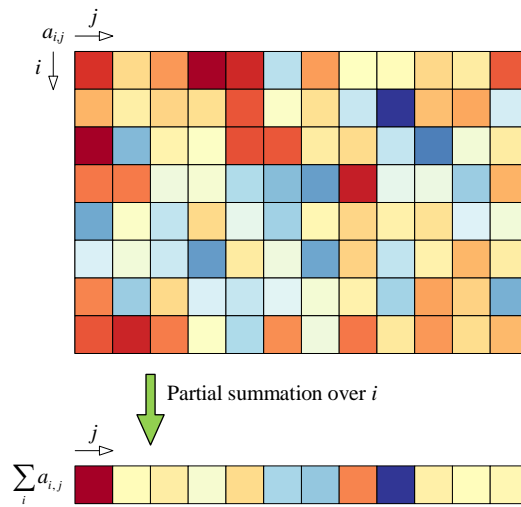


图 20. 将二维数组的第 7 列求和

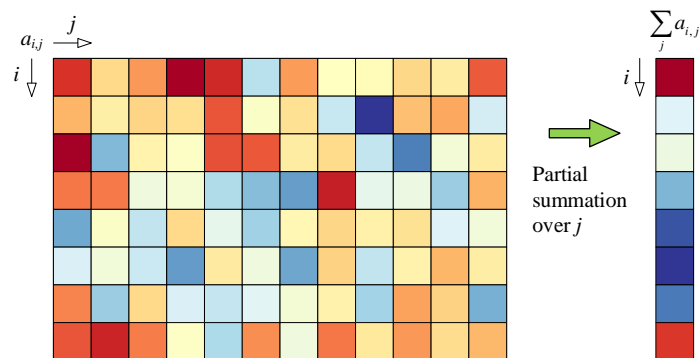
这相当于矩阵 $a_{i,j}$ 沿着索引 i 被“压扁”。如图 21 所示，原来数据有两个维度——索引 i 和 j ；而现在只剩一个维度——索引 j 。

图 21. 将二维数组沿着索引 i 代表的方向“压扁”

同理，如图 22 所示， $a_{i,j}$ 对索引 j 偏求和 $\sum_j a_{i,j}$ ，相当于沿着索引 j 方向将数组“压扁”； $\sum_j a_{i,j}$ 只剩 i 这一个维度。

白话说， $a_{i,j}$ 就是个“表格”， $\sum_j a_{i,j}$ 就是按行求和，每行一个和。

$\sum_j a_{i,j}$ 除以 m ，得到的就是每一行元素的平均数。

图 22. 将二维数组沿着索引 j 代表的方向“压扁”

多重求和

而 $\sum_i a_{i,j}$ 和 $\sum_j a_{i,j}$ 沿着各自剩余最后一个方向再次“压扁”，得到的就是 $a_{i,j}$ 所有元素的和。

这种情况，求和顺序不影响结果，即：

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{i,j} = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n a_{i,j} \quad (43)$$

Sum over j Sum over i

上式也可以写作：

$$\sum_{j,i} a_{i,j} = \sum_{i,j} a_{i,j} \quad (44)$$

下标“ j, i ”表示先对 j 求和、再对 i 求和；下标“ i, j ”表示先对 i 求和、再对 j 求和。

图 23 所示为上述计算的过程分解。注意，只有数组是“方方正正”的结构时，上式才成立；否则，求和先后顺序会影响到结果。这一点和多重积分中积分先后顺序原理一致。

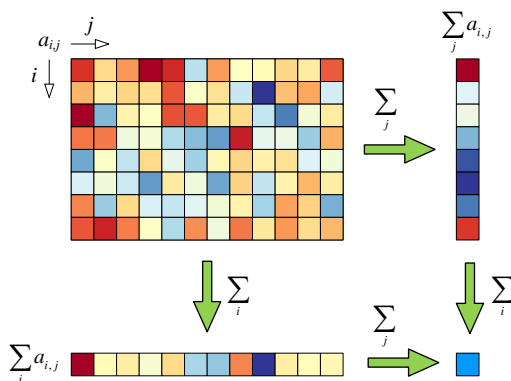


图 23. 求和顺序不影响结果

举个例子：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=2}^4 a_{i,j} &= \sum_{i=1}^3 a_{i,2} + a_{i,3} + a_{i,4} \\ &= (a_{1,2} + a_{1,3} + a_{1,4}) + (a_{2,2} + a_{2,3} + a_{2,4}) + (a_{3,2} + a_{3,3} + a_{3,4}) \end{aligned} \quad (45)$$

调换求和顺序，得到：

$$\begin{aligned} \sum_{j=2}^4 \sum_{i=1}^3 a_{i,j} &= \sum_{j=2}^4 a_{1,j} + a_{2,j} + a_{3,j} \\ &= (a_{1,2} + a_{2,2} + a_{3,2}) + (a_{1,3} + a_{2,3} + a_{3,3}) + (a_{1,4} + a_{2,4} + a_{3,4}) \end{aligned} \quad (46)$$

可以发现 (45) 和 (46) 两式相等。

矩阵运算视角

前文介绍的“偏求和”和多重求和都可以通过矩阵运算得到结果。

如图 24 所示， $a_{i,j}$ 对索引 i 偏求和等价于如下矩阵运算：

$$\mathbf{I}^T \mathbf{A} = \sum_i a_{i,j} \quad (47)$$

注意，上式中全 1 列向量 \mathbf{I} 的形状为 8×1 ，转置得到 \mathbf{I}^T 的形状为 1×8 。

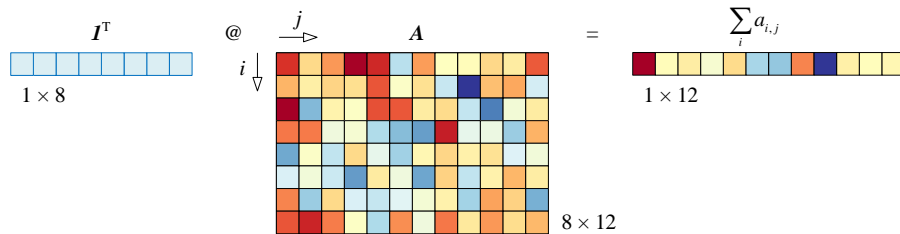


图 24. 计算矩阵 \mathbf{A} 每列元素和

如图 24 所示， a_{ij} 对索引 j 偏求和等价于如下矩阵运算：

$$\mathbf{A} \mathbf{I} = \sum_j a_{i,j} \quad (48)$$

注意，上式中全 1 列向量 \mathbf{I} 的形状为 12×1 。

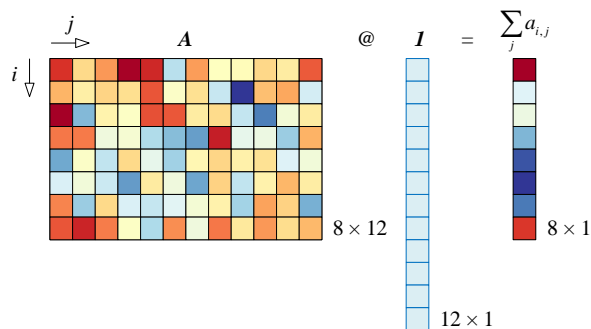
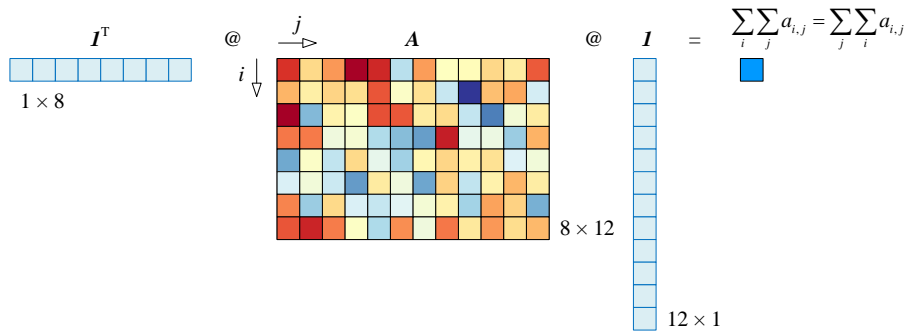


图 25. 计算矩阵 \mathbf{A} 每行元素和

如图 26 所示，求矩阵 \mathbf{A} 所有元素之和对应的矩阵运算为：

$$\sum_i \sum_j a_{i,j} = \sum_j \sum_i a_{i,j} = \mathbf{I}^T \mathbf{A} \mathbf{I} \quad (49)$$

再次强调，上式中两个全 1 向量形状不同。

图 26. 计算二维矩阵 A 所有元素之和

两个以上索引

某一项可能有超过两个索引，比如 $a_{i,j,k}$ 有三个索引，数组 $\{a_{i,j,k}\}$ 相当于有三个维度。

图 27 所示为三维数组的多重求和运算，求和的顺序为“ j, i, k ”。

首先， $a_{i,j,k}$ 沿 j 索引求和，得到 $\sum_j a_{i,j,k}$ 。相当于一个立方体“压扁”为一个平面，三维降维到二维。

然后，再沿 k 索引求和，进一步将平面“压扁”得到一维数组。此时，数组只有一个索引 i 。

最后，沿着 i 再求和，得到一个标量 $\sum_{j,i,k} a_{i,j,k}$ 。

请大家自行绘制按照“ i, j, k ”这个顺序求和得到 $\sum_{i,j,k} a_{i,j,k}$ 过程示意图。

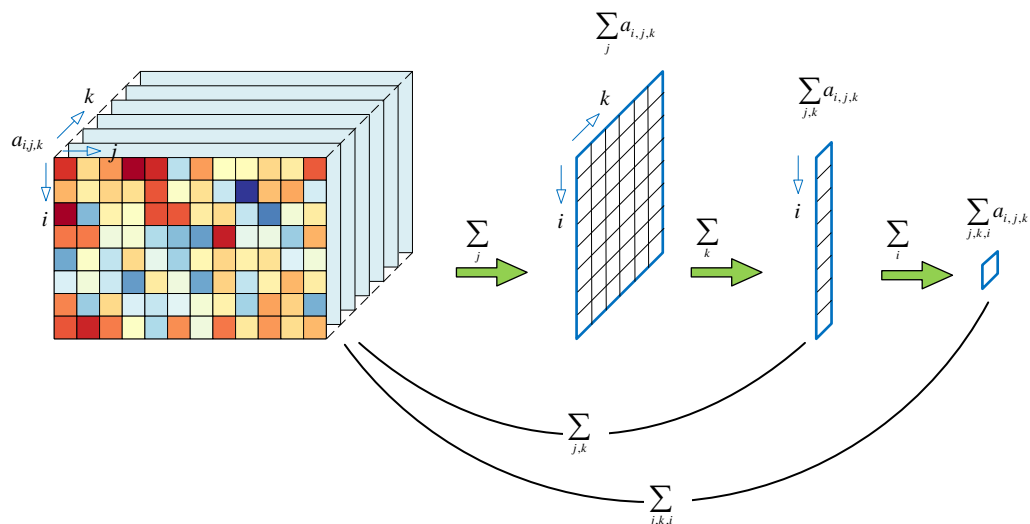


图 27. 三维数组的求和运算

对于多维数组，建议大家了解一下 Python 中 xarray 这个工具包。此外，Pandas 数据帧也是处理多维数组不错的工具。本系列丛书会介绍 xarray 和 Pandas 这两个工具。

爱因斯坦曾经提出过以自己名字命名的求和法则，叫做爱因斯坦求和约定 (Einstein summation convention)。Numpy 中 numpy.einsum() 函数的运算规则就是基于爱因斯坦求和约定。这个数学工具简化多维数组求和运算，本系列丛书《矩阵力量》将展开介绍。

表 2. 求和和求积的英文表达

数学表达	英文表达
$\sum_{i=1}^n a_i$	The sum of all the terms (small) a sub (small) i , where i takes the integers from one to (small) n . The sum from (small) i equals one to (small) n , (small) a sub i . The sum as (small) i runs from one to n of (small) a sub (small) i .
$\sum_{n=1}^5 2n$	The sum of 2 times n as n goes from 1 to 5. The summation of the expression $2n$ for integer values of n from 1 to 5.
$\prod_{i=1}^n a_i$	The multiplication of all the terms a sub i , where i takes the values from one to n . The product from i equals 1 to n of a sub i .
$\prod_{i=1}^{\infty} y_i$	The product from i equals one to infinity of y sub i .



Bk3_Ch14_04.py 绘制本节二维数组热图，并计算“偏求和”。请大家自行计算这个二维数组所有元素之和。

14.7 数列极限：微积分的一块基石

数列极限

数列 $\{a_n\}$ 极限存在的确切定义如下。

设 $\{a_n\}$ 为一数列，如果存在常数 C ，对于任意给定的正数 ε ，不管 ε 有多小，总存在正整数 N ，使得 $n > N$ 时，如下不等式均成立，

$$|a_n - C| < \varepsilon \quad (50)$$

那么就称常数 C 是数列 $\{a_n\}$ 的极限；也可以说，数列 $\{a_n\}$ 收敛于 C ：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = C \quad (51)$$

其中，lim 是英文 limit 的缩写， $n \rightarrow \infty$ 表达 n 趋向无穷。

如果，极限 C 不存在，则称数列 $\{a_n\}$ 极限不存在。

几个例子

给定如下等比数列：

$$a_n = \frac{1}{2^n} \quad (52)$$

当 n 趋向于无穷，数列值趋向于零：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2^n} = 0 \quad (53)$$

对于如下数列，当 n 趋向无穷时，数列值在两个定值之间震荡；因此，不存在极限：

$$a_n = (-1)^n \quad (54)$$

对于如下数列，当 n 趋向无穷时，数列值急速增加至无穷，即发散；因此，也不存在极限：

$$a_n = 2^n \quad (55)$$

收敛的数列，可以自下而上收敛、自上而下收敛、振荡收敛。

图 28 给出了三个收敛数列的例子。图 28 (c) 对应的数列如下：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n = e \quad (56)$$

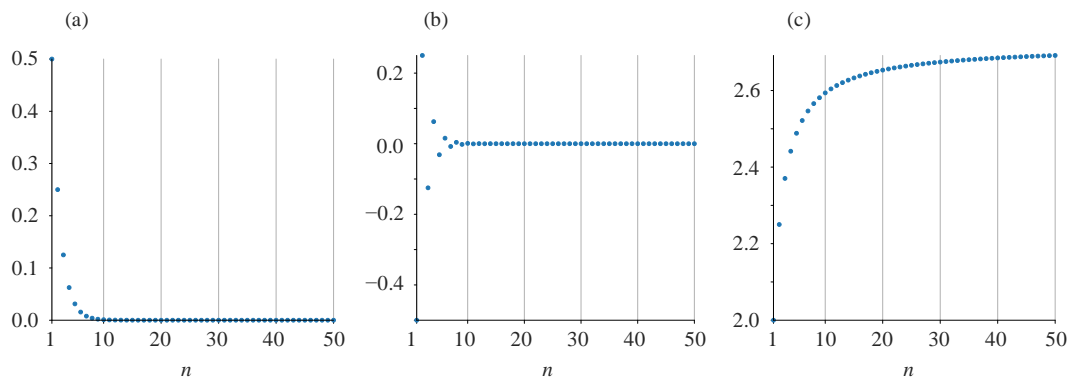


图 28. 收敛数列

数列和的极限

此外，数列之和也可以收敛。下式就是一个收敛的数列之和，数列之和随 n 变化趋势如图 29 (a) 所示：

$$1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n} = 2 \quad (57)$$

如图 29 (b) 所示，以下数列之和也是收敛于 1：

$$\frac{1}{1 \times 2} + \frac{1}{2 \times 3} + \frac{1}{3 \times 4} + \frac{1}{4 \times 5} + \frac{1}{5 \times 6} + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(n+1)} = 1 \quad (58)$$

如图 29 (c) 所示，自然对数底数 e 也可以用数列和的极限来近似：

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} = 1 + \frac{1}{1} + \frac{1}{1 \times 2} + \frac{1}{1 \times 2 \times 3} + \frac{1}{1 \times 2 \times 3 \times 4} + \cdots = e \quad (59)$$

但是 $1/n$ 这个数列之和并不收敛：

$$1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \frac{1}{5} + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \quad (60)$$

如果在以上数列中每一项增加正负号交替，这个数列之和收敛：

$$1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} = \ln(2) \quad (61)$$

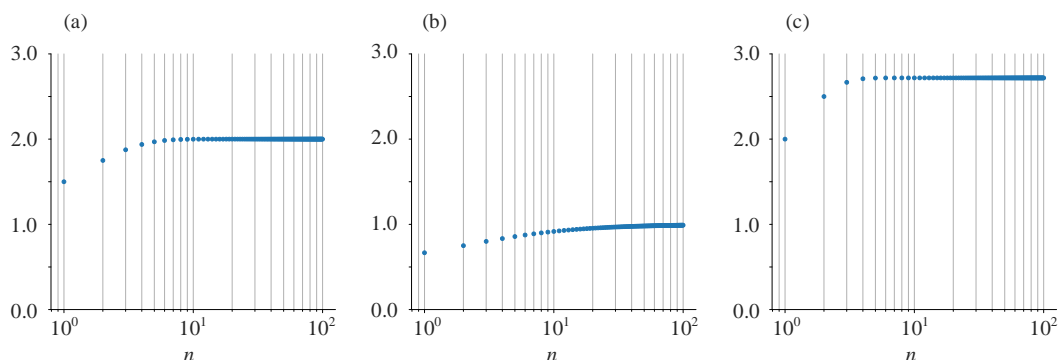


图 29. 数列之和收敛



Bk3_Ch14_05.py 绘制图 29。代码中利用 `sympy.limit_seq()` 函数计算极限值。

14.8 数列极限估算圆周率

本书前文介绍，古代数学家通过割圆术不断提高圆周率的估算精度。随着数学方法的发展，很多数学家发现可以用数列和来逼近圆周率。这是圆周率估算的一次颠覆性进步。

比如莱布尼兹发现，如下数列之和逼近 $\pi/4$ ：

$$\frac{\pi}{4} \approx 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \dots + \frac{(-1)^{n+1}}{2n-1} \quad (62)$$

即

$$\pi = 4 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{2k-1} \quad (63)$$

图 30 所示为上式随着 k 不断增加逼近圆周率值。

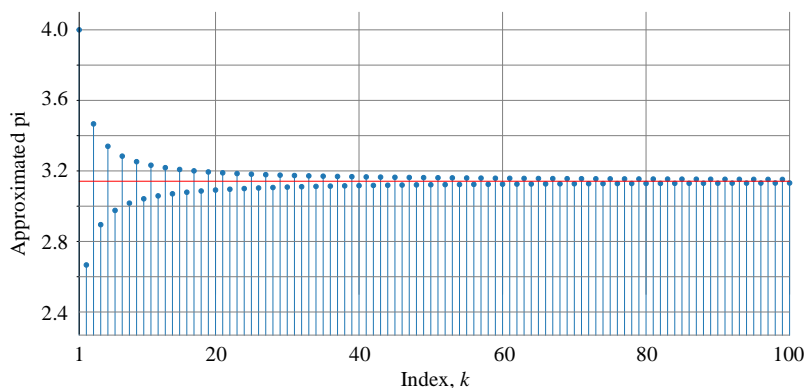


图 30. 数列之和逼近圆周率



Bk3_Ch14_06.py 绘制图 30。



本章介绍的大西格玛求和、极限这两个数学工具是微积分的基础。

大家在学习大西格玛求和时，请务必从几何、数据、维度、矩阵运算这几个视角分析求和运算；不然，复杂多层求和运算会让大家晕头转向。

此外，有了数列和极限这两个数学概念，我们在圆周率估算方法上又进一步。