

- 我们先来一个相对简单的例子。假设我们有两个随机变量 $x_1, x_2$ ，各自服从一个高斯分布  $N_1(\mu_1, \sigma_1^2), N_2(\mu_2, \sigma_2^2)$ ，那么这两个分布的KL散度该怎么计算呢？

我们知道

$$N(\mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

那么 $KL(p_1, p_2)$ 就等于

$$\begin{aligned} & \int p_1(x) \log \frac{p_1(x)}{p_2(x)} dx \\ &= \int p_1(x) (\log p_1(x) - \log p_2(x)) dx = \int p_1(x) * \left( \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} e^{-\frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2}} - \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} e^{-\frac{(x-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2}} \right) dx \\ &= \int p_1(x) * \left( -\frac{1}{2} \log 2\pi - \log \sigma_1 - \frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2} + \frac{1}{2} \log 2\pi + \log \sigma_2 + \frac{(x-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \right) dx \\ &= \int p_1(x) \left( \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \left[ \frac{(x-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2} - \frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2} \right] \right) dx \\ &= \int \left( \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \right) p_1(x) dx + \int \left( \frac{(x-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \right) p_1(x) dx - \int \left( \frac{(x-\mu_1)^2}{2\sigma_1^2} \right) p_1(x) dx \\ &= \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \frac{1}{2\sigma_2^2} \int ((x-\mu_2)^2) p_1(x) dx - \frac{1}{2\sigma_1^2} \int ((x-\mu_1)^2) p_1(x) dx \end{aligned}$$

(更新) 到这里停一下，有童鞋问这里右边最后一项的化简，这时候积分符号里面的东西是不看着很熟悉？没错，就是我们常见的方差嘛，于是括号内外一约分，就得到了最终的结果—— $\frac{1}{2}$ 。

好，继续。

$$\begin{aligned} &= \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \frac{1}{2\sigma_2^2} \int ((x-\mu_2)^2) p_1(x) dx - \frac{1}{2} \\ &= \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \frac{1}{2\sigma_2^2} \int ((x-\mu_1 + \mu_1 - \mu_2)^2) p_1(x) dx - \frac{1}{2} \\ &= \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \frac{1}{2\sigma_2^2} \left[ \int (x-\mu_1)^2 p_1(x) dx + \int (\mu_1 - \mu_2)^2 p_1(x) dx + 2 \int (x-\mu_1)(\mu_1 - \mu_2) p_1(x) dx \right] - \frac{1}{2} \\ &= \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \frac{1}{2\sigma_2^2} \left[ \int (x-\mu_1)^2 p_1(x) dx + (\mu_1 - \mu_2)^2 \right] - \frac{1}{2} \\ &= \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \frac{\sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

得出来了，我们假设N2是一个正态分布，也就是说  $\mu_2 = 0, \sigma_2^2 = 1$  那么N1长成什么样子能够让KL散度尽可能地小呢？

也就是说  $KL(\mu_1, \sigma_1) = -\log\sigma_1 + \frac{\sigma_1^2 + \mu_1^2}{2} - \frac{1}{2}$ 。

我们用“肉眼”看一下就能猜测到当  $\mu_1 = 0, \sigma_1 = 1$  时，KL散度最小。从公式中可以看出，如果  $\mu_1$  偏离了0，那么KL散度一定会变大。而方差的变化则有些不同：

当  $\sigma_1$  大于1时， $\frac{1}{2}\sigma_1^2$  将越变越大，而  $-\log\sigma_1$  越变越小；

当  $\sigma_1$  小于1时， $\frac{1}{2}\sigma_1^2$  将越变越小，而  $-\log\sigma_1$  越变越大；

那么哪边的力量更强大呢？我们可以作图出来：

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
x = np.linspace(0.5, 2, 100)
y = -np.log(x) + x*x/2 - 0.5
plt.plot(x, y)
plt.show()
```

从图中可以看出









