

模式识别与计算机视觉

概率、统计、线性代数极简回顾
最近邻方法的回顾

张振宇
智能科学与技术学院
2025

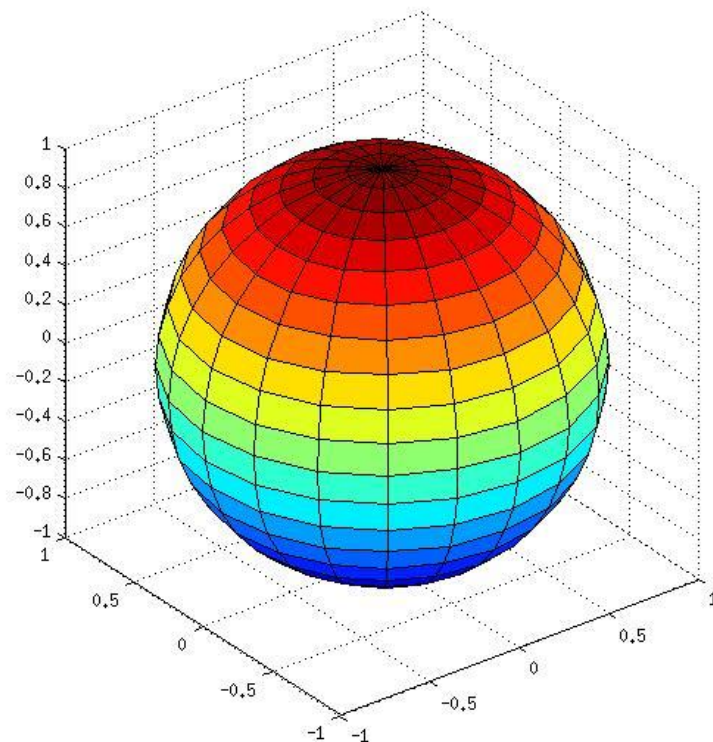
目标

- ✓ 回忆**掌握**相关基本概念和最重要的定理
- ✓ 能够熟练**应用**提供的资源查表
- ✓ 提高目标
 - 理解相关定理的证明和推导过程
 - 能不查表熟练应用重要的一些定理和推导
 - **进一步**：能通过查表掌握一些课堂没有讲授的定理，并能应用到学习、研究中遇到的问题中去

线性代数

向量 (vector)

- ✓ $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d)^T \in \mathbb{R}^d$
- ✓ 内积 (dot-product, inner-product, 点积)
 - $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{x} = \sum_{i=1}^d x_i y_i$
- ✓ 向量的长度 (vector norm)
 - $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}, \|\mathbf{x}\|^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{x}$
 - 若 $\|\mathbf{x}\| = 1$, 称 \mathbf{x} 为单位向量
- ✓ 正交 (orthogonal)
 - $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = 0$
 - \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 被称为垂直 (perpendicular): $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$



内积、角度、投影

✓ \mathbf{x} : $\|\mathbf{x}\|$ 决定长度, $\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}$ 决定方向

✓ 向量之间的夹角(angle):

- $\mathbf{x}^T \mathbf{y} = \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\| \cdot \cos \theta$

- $\mathbf{x}^T \mathbf{y} \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|$

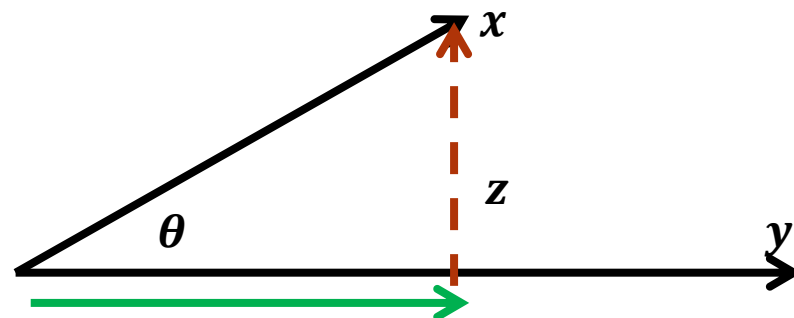
✓ \mathbf{x} 在 \mathbf{y} 上的投影(projection)

- 方向: $\frac{\mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|}$ 长度: $\|\mathbf{x}\| \cos \theta = \|\mathbf{x}\| \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|} = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|}$

- 投影 $\text{proj}_{\mathbf{y}} \mathbf{x}$: $\frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\|\mathbf{y}\|^2} \mathbf{y}$

- $\text{proj}_{\mathbf{y}} \mathbf{x} \perp \mathbf{z}$

- $\text{proj}_{\mathbf{y}} \mathbf{x} + \mathbf{z} = \mathbf{x}$



柯西-施瓦茨不等式

✓ Cauchy's inequality

- $(\sum_{k=1}^n a_k b_k)^2 \leq (\sum_{k=1}^n a_k^2)(\sum_{k=1}^n b_k^2)$
- 等号成立当且仅当存在固定实数 c , 使得 $\forall k, a_k = c b_k$

✓ Schwarz's Inequality

- $\left[\int_a^b f(x)g(x)dx \right]^2 \leq \left[\int_a^b [f(x)]^2 dx \right] \left[\int_a^b [g(x)]^2 dx \right]$
- 等号成立当且仅当存在固定实数 c , 使得 $\forall x \in [a, b], f(x) = c g(x)$

矩阵(Matrix)

✓ $X = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m1} & \cdots & x_{mn} \end{bmatrix}$: $m \times n$ 的矩阵

- $n = m$ 时称为方阵(square matrix)
 - 行矩阵(row matrix, 行向量): $m = 1$
 - 列矩阵(column matrix, 列向量, 向量): $n = 1$
- ✓ 对角阵(diagonal matrix): 方阵中, 只有对角线非零
- ✓ 单位阵(identity matrix): 对角线全部为1的对角阵
- 一般记为 I 或者 I_n

矩阵运算

- ✓ 乘法: $X: m \times n, Y: n \times p$
 - 维度(dimensionality)相符时乘法才有定义
 - 一般来说 $XY \neq YX$
- ✓ 矩阵的幂(power)
 - 对方阵有定义: $X^2 = XX, X^3 = XXX, \dots$
- ✓ 转置(transpose)
 - $X: m \times n$, 那么 $X^T: n \times m$
 - $X^T X: n \times n, XX^T: m \times m$
- ✓ 对称矩阵(symmetric matrix)
 - 是方阵, $X_{ij} = X_{ji}, \forall i, j$

行列式值、矩阵的逆

✓ 方阵的行列式值(determinant)

- $|X|$, 或写作 $\det(X)$
- $|X| = |X^T|$
- $|XY| = |X||Y|$
- $|\lambda X| = \lambda^n |X| \quad (X: n \times n)$

✓ 方阵的逆矩阵(inverse matrix)

- X^{-1} : 满足 $XX^{-1} = X^{-1}X = I_n$
- X 可逆(invertible) $\equiv |X| \neq 0 \quad (\Leftrightarrow)$
- $(X^{-1})^{-1} = X, (\lambda X)^{-1} = \frac{1}{\lambda} X^{-1}$
- $(XY)^{-1} = Y^{-1}X^{-1}, (X^{-1})^T = (X^T)^{-1}$

方阵的特征值、特征向量、迹

✓ 特征值(eigenvalue)和特征向量(eigenvector)

- $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ $A: n \times n$
- λ :特征值 \mathbf{x} :特征向量

✓ n 阶方阵有 n 个特征值

- 可能存在相等的特征值

✓ 特征值和对角线的关系

- $\sum_{i=1}^n a_{ii} = \sum_{i=1}^n \lambda_i$
- $\det(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i$

✓ 方阵的迹(trace)

- $\text{tr}(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii} = ??$, $\text{tr}(\textcolor{red}{AB}) = \text{tr}(\textcolor{red}{BA})$

实对称矩阵

✓ 对称矩阵，每个项都是实数

- Real symmetric matrix
- 这门课程中最常用到

✓ 性质：

- 所有特征值都是实数，特征向量都是实向量
- 特征值记为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$
- 对应的特征向量记为 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ ，单位向量
- 特征向量互相垂直： $\xi_i^T \xi_j = 0$ ($i \neq j$)
- $E = [\xi_1 \ \xi_2 \ \dots \ \xi_n]$ 是 $n \times n$ 的，是满秩(full rank)的， $\text{rank}(E) = n$.

实对称矩阵的分解(decomposition)

- ✓ $X: n \times n$ 的实对称矩阵
 - 特征值为 λ_i , 其对应的特征向量为 ξ_i
- ✓ $X = \sum_{i=1}^n \lambda_i \xi_i \xi_i^T$
 - 称为谱分解(spectral decomposition)
 - 约定 $\|\xi_i\| = 1$, 则 E 是正交矩阵(orthogonal matrix)
 - $X = E \Lambda E^T$
 - Λ 是一个对角矩阵, $\Lambda_{ii} = \lambda_i$
 - $EE^T = E^T E = I$, $E^{-1} = ?$, $|E| = ?$
- ✓ 进一步阅读
 - LU分解, Cholesky分解, QR分解
 - 资源: [Numerical Recipes series](#)

正定、半正定

- ✓ 对称方阵 A 是正定的(positive definite)当且仅当
 - $\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad \mathbf{x}^T A \mathbf{x} = \sum_{i,j} x_i x_j A_{ij} > 0$
 - $\forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0} \quad \mathbf{x}^T A \mathbf{x} \geq 0$ 则 A 为半正定(positive semi-definite)
 - 分别记为 $A \succ 0$ 或 $A \succeq 0$
- ✓ $\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$: 称为二次型(quadratic)
 - 这门课程会经常用到, 一般满足 $A \succeq 0$
- ✓ 等价关系
 - 1. $A \succ 0$ ($A \succeq 0$)
 - 2. 特征值全部为正数 (非负实数)
- ✓ 正定矩阵的任意主子矩阵也是正定矩阵

矩阵求导

✓ 假设一切求导的条件都满足（导数都存在）

✓ $\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x}$ 是一个向量, $\left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x}\right)_i = \frac{\partial a_i}{\partial x}$

✓ 对于矩阵, $\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{\partial A_{ij}}{\partial x}$

✓ $\left(\frac{\partial x}{\partial \mathbf{a}}\right)_i = \frac{\partial x}{\partial a_i}$ $\left(\frac{\partial x}{\partial A}\right)_{ij} = \frac{\partial x}{\partial A_{ij}}$ $\left(\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{\partial a_i}{\partial x_j}$

✓ 如何求导？

- 能够查表并合理应用
- The Matrix Cookbook 最好打印前两章上课时带着

矩阵求导

2 Derivatives

This section is covering differentiation of a number of expressions with respect to a matrix \mathbf{X} . Note that it is always assumed that \mathbf{X} has *no special structure*, i.e. that the elements of \mathbf{X} are independent (e.g. not symmetric, Toeplitz, positive definite). See section 2.8 for differentiation of structured matrices. The basic assumptions can be written in a formula as

$$\frac{\partial X_{kl}}{\partial X_{ij}} = \delta_{ik}\delta_{lj} \quad (32)$$

that is for e.g. vector forms,

$$\left[\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{y}} \right]_i = \frac{\partial x_i}{\partial y} \quad \left[\frac{\partial x}{\partial \mathbf{y}} \right]_i = \frac{\partial x}{\partial y_i} \quad \left[\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{y}} \right]_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial y_j}$$

The following rules are general and very useful when deriving the differential of an expression ([19]):

$$\partial \mathbf{A} = 0 \quad (\mathbf{A} \text{ is a constant}) \quad (33)$$

$$\partial(\alpha \mathbf{X}) = \alpha \partial \mathbf{X} \quad (34)$$

$$\partial(\mathbf{X} + \mathbf{Y}) = \partial \mathbf{X} + \partial \mathbf{Y} \quad (35)$$

$$\partial(\text{Tr}(\mathbf{X})) = \text{Tr}(\partial \mathbf{X}) \quad (36)$$

$$\partial(\mathbf{X}\mathbf{Y}) = (\partial \mathbf{X})\mathbf{Y} + \mathbf{X}(\partial \mathbf{Y}) \quad (37)$$

$$\partial(\mathbf{X} \circ \mathbf{Y}) = (\partial \mathbf{X}) \circ \mathbf{Y} + \mathbf{X} \circ (\partial \mathbf{Y}) \quad (38)$$

$$\partial(\mathbf{X} \otimes \mathbf{Y}) = (\partial \mathbf{X}) \otimes \mathbf{Y} + \mathbf{X} \otimes (\partial \mathbf{Y}) \quad (39)$$

$$\partial(\mathbf{X}^{-1}) = -\mathbf{X}^{-1}(\partial \mathbf{X})\mathbf{X}^{-1} \quad (40)$$

$$\partial(\det(\mathbf{X})) = \text{Tr}(\text{adj}(\mathbf{X})\partial \mathbf{X}) \quad (41)$$

$$\partial(\det(\mathbf{X})) = \det(\mathbf{X})\text{Tr}(\mathbf{X}^{-1}\partial \mathbf{X}) \quad (42)$$

$$\partial(\ln(\det(\mathbf{X}))) = \text{Tr}(\mathbf{X}^{-1}\partial \mathbf{X}) \quad (43)$$

$$\partial \mathbf{X}^T = (\partial \mathbf{X})^T \quad (44)$$

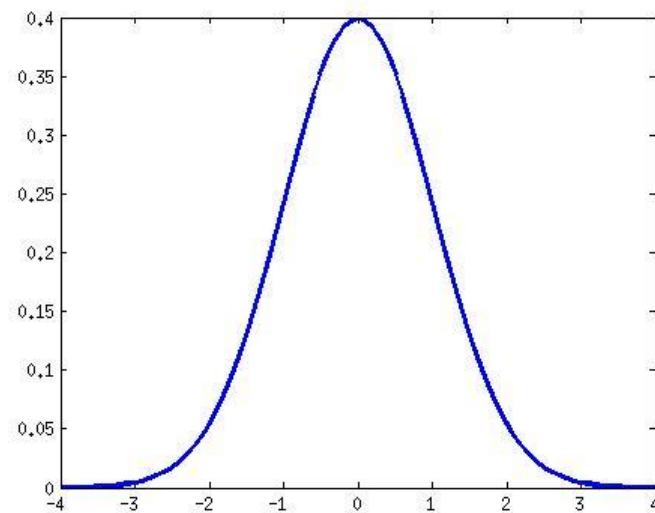
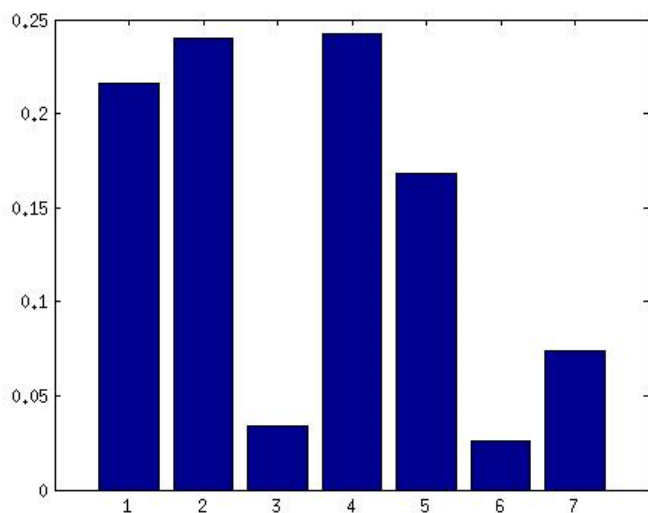
$$\partial \mathbf{X}^H = (\partial \mathbf{X})^H \quad (45)$$

概率与统计

Probability & Statistics

随机变量(Random variable)

✓ X : 可以是离散(discrete)、连续(continuous)、或者混合(hybrid)的



概率密度函数

- ✓ (古典) 离散(discrete):
 - 可数的(countable)不相容的若干事件 c_1, c_2, \dots
 - $p(X = x_i) = c_i$ -- probability mass function
 - $c_i \geq 0, \sum_i c_i = 1$ --pmf是合法的
- ✓ 连续(continuous): 为简化, 只考虑 $X \in (-\infty, \infty)$
 - $p(x)$: 概率密度函数probability density function (pdf)
 - $p(x) \geq 0, \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1$
- ✓ 随机变量可以粗略地看成是一个函数, 而不是一个数学分析意义上的变量

累积分布函数(连续)

✓ Cumulative distribution function (cdf)

✓ $F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x p(x) dx$

- $F(-\infty) = 0 \leq F(x) \leq F(+\infty) = 1$

- 非減性(non-decreasing)

如果 $x \leq y$, 那么 $F(x) \leq F(y)$

- $P(X = x) = ?$

- $P(x_1 < x < x_2) = F(x_2) - F(x_1) = \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx$

✓ PDF和CDF的关系

- $p(x) = F'(x)$

联合、条件分布、变换

✓ 联合(joint distribution): $P(X = \mathbf{x})$ 多维变量

- $p(\mathbf{x}) \geq 0 \quad \int p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1$

✓ 条件(conditional distribution): $P(X = x|Y = y)$

✓ $p(x, y) = p(y)p(x|y)$

✓ $p(x) = \int_y p(x, y) dy$ --marginal (边际) 分布

✓ 假设 $x = g(y)$, 那么

$$p_Y(y) = p_X(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| = p_X(g(y)) |g'(y)|$$

- 对 g 的具体要求: 单调固定函数

多维分布的期望

- ✓ 假设有函数 $f(\mathbf{x})$ ，在 \mathbf{x} 服从分布 $p(\mathbf{x})$ 时：
- ✓ f 的期望(expectation)，记为 $E[f(X)]$
 - $E[f(X)] = \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot p(X = \mathbf{x})$ ，或
 - $E[f(X)] = \int f(\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x}$
 - 条件期望 $E(f(\mathbf{x})|Y = \mathbf{y}) = \sum_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \cdot p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$
- ✓ f 的方差(Variance, 一维)或协方差(covariance, 多维)
 - $\text{Var}(X) = E[(X - EX)^2]$
 - $\text{Var}(X) = E[X^2] - (EX)^2$
- ✓ 当 $p(\mathbf{x})$ 和 $f(\mathbf{x})$ 固定时
 - 期望、方差是一个确定的数（或向量、矩阵）
 - $g(y) = E(X|Y = y)$ 是什么？

估计均值和协方差矩阵

✓ 训练样本: $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$

✓ 均值的估计 estimation:

$$\bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i$$

✓ Covariance的估计

$$\text{Cov}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T$$

无偏估计 unbiased estimation

$$\text{Cov}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})(\mathbf{x}_i - \bar{\mathbf{x}})^T$$

两个随机变量的独立、相关

- ✓ 一般说来 $p(x, y) \neq p(x)p(y)$
- ✓ 如果 $\forall x, y, p(x, y) = p(x)p(y)$, 则 X 和 Y 互相独立 (independent)
- ✓ $\text{Cov}(X, Y) = E[(X - EX)(Y - EY)]$
- ✓ Pearson 相关系数 (Pearson's correlation coefficient):
 $-1 \leq \rho_{XY} \leq 1$

$$\rho_{XY} = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{\text{Var}(X)\text{Var}(Y)}},$$

- $\rho_{XY} = 0$, 称为不相关 (not correlated)
- $\rho_{XY} = \pm 1$, 称为完全相关, 如存在线性关系
- 独立保证一定不相关, 但是, 不相关不一定能保证独立

高斯分布

✓ 又叫正态分布, normal distribution, Gaussian distribution

✓ 单变量或一维高斯分布 $N(\mu, \sigma^2)$

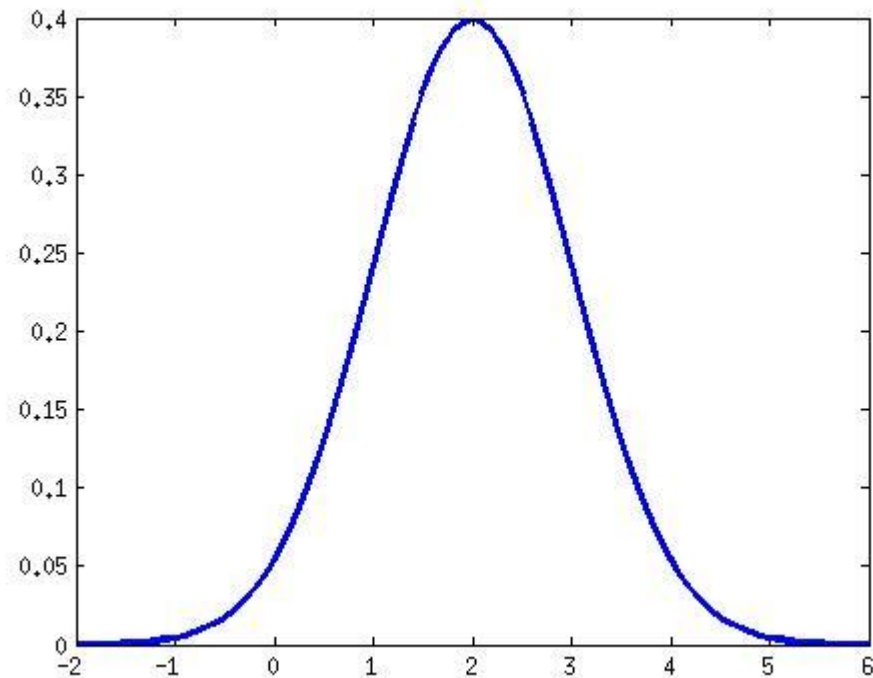
$$p(x) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}}(\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x - \mu)(\sigma^2)^{-1} (x - \mu) \right\}$$

或者 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \right)$ 更眼熟?

✓ μ : 期望, 或称均值

✓ σ^2 : 方差

- σ : 标准差 (standard deviation)



- ✓ 图例中 $\mu = 2, \sigma = 1$,
- ✓ Markov不等式: 若 $X \geq 0$ (非负随机变量), 则
$$P(X \geq a) \leq \frac{EX}{a}$$
- ✓ Chebyshev不等式: 对任何分布, $P((X - \mu)^2 \geq k^2) \leq \frac{\sigma^2}{k^2}$ 或 $P(|X - \mu| > k) \leq \frac{\sigma^2}{k^2} (k > 0)$

多维高斯分布

✓ 一维:

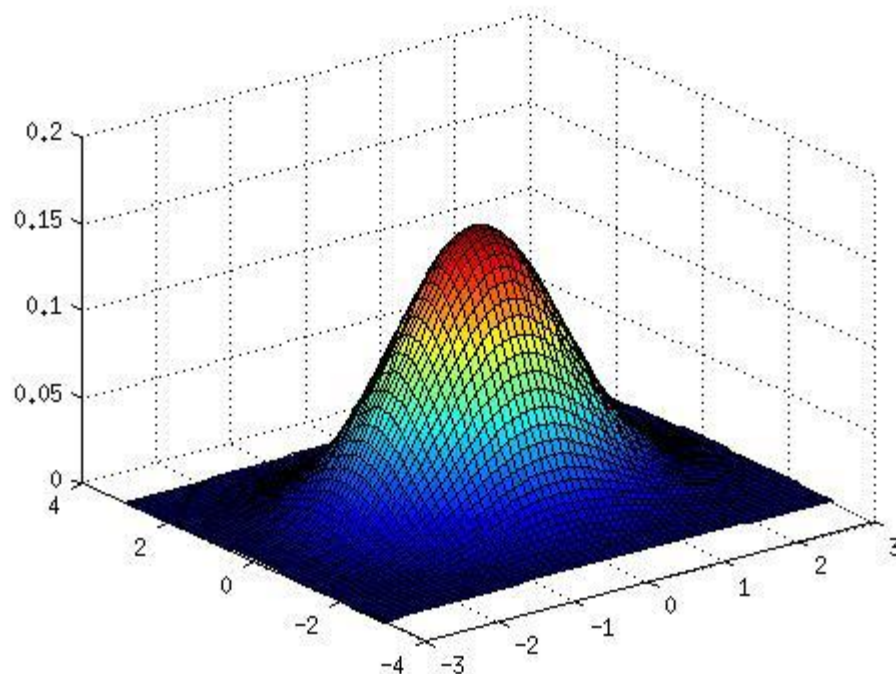
$$p(x) = (2\pi)^{-\frac{1}{2}}(\sigma^2)^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (x - \mu)(\sigma^2)^{-1} (x - \mu) \right\}$$

✓ 多维

$$p(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{D}{2}} |\Sigma|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\}$$

- D : 维数 记为 $\mathbf{x} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$
- Σ : 协方差矩阵
- $\boldsymbol{\mu}$: 均值

多维高斯PDF示意图



- ✓ 图例中 $\mu = (0,0)$, $\Sigma = I_2$
- ✓ 更多相关知识，将在PCA中讲授

高斯分布中的相关性和独立

- ✓ 一般来说，两变量
 - 独立保证一定不相关
 - 不相关不一定保证独立
- ✓ 但是，对于多维高斯分布
 - 不相关意味着协方差矩阵中非对角线项是0
 - c_{ii} ... 0
 - \vdots \vdots \vdots
 - 0 ... c_{jj}
 - 在正态分布中，不相关就等价于独立

多维与一维高斯的关系

✓ 多维高斯 $X = \begin{pmatrix} X_a \\ X_b \end{pmatrix}$

- 条件分布: $\mathbf{x}_a | \mathbf{x}_b$ 还是高斯分布

- 边际分布(margin distribution):

$p(\mathbf{x}_a) = \int p(\mathbf{x}_a, \mathbf{x}_b) d\mathbf{x}_b$ 也是高斯分布

✓ 两个高斯分布的加权和也是高斯分布

- $aX + bY$

✓ 为什么大家用高斯分布?

优化基础知识

- ✓ 本课程主要利用已有优化软件，不讲授优化算法或者理论
 - 最优化自身是一门复杂的课程
 - 自学教材第2.3节（到2.3.1节之前）
- ✓ 知识要点：
 - 凸集、凸函数
 - 自学教材第2.3.2节
 - 拉格朗日乘子法（等式约束）
 - 自学教材第2.3.3节
 - 算法复杂性
 - 自学教材第2.4节

进一步的阅读

- ✓ 如果对本章的内容感兴趣，可以参考如下文献
 - 教材第13章
 - 在“Advanced topics”中
 - 特点是尽量从最基本的概念出发，提供了所有必须的背景数学知识，所以会比一般的英文tutorial容易懂
- ✓ PRML的相关章节（第二章和附录）

最近邻规则

Nearest neighbor rule

问题设置problem setup

✓ 分类问题classification

- 训练集 $D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)\}$
- 训练样本(sample): $\mathbf{x}_i \in \mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^d$
- 样本的标记(label): $y_i \in \mathcal{Y} = \{1, 2, \dots, C\}$
 - 样本一共被分为 C 个类别(category)
 - 例如, 在我们的例子里, $C = 2$, $y_i = 1$ (男) 或者 $y_i = 2$ (女)

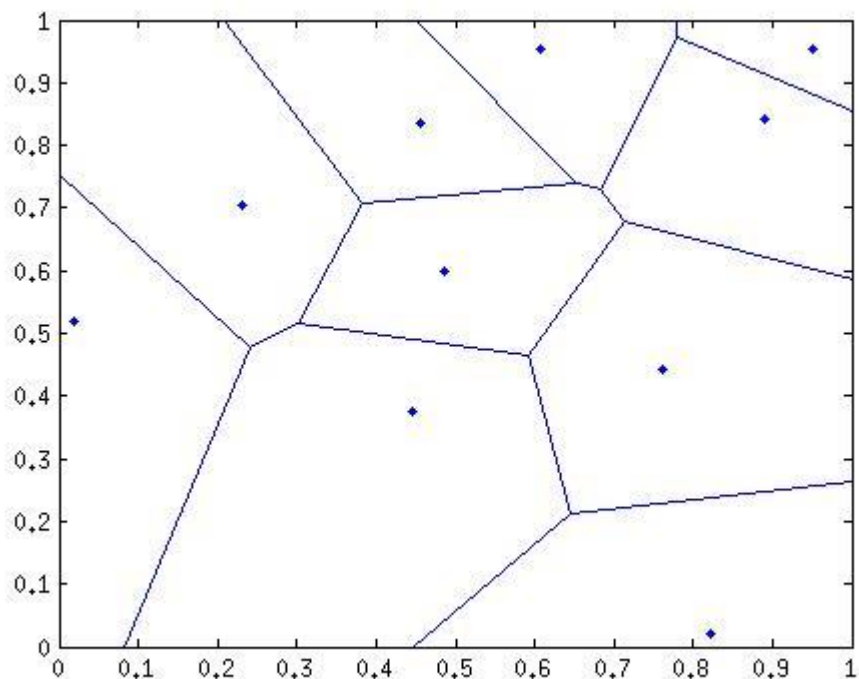
✓ 存在一个距离(distance)函数: $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}$

- 能够度量 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 之间的距离, 或者不相似程度(level of dissimilarity)

最近邻规则和Voronoi图

给定一个测试样例 \mathbf{x}

1. 发现其最近邻 $i^* = \underset{i}{\operatorname{argmin}} d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$
2. 输出对 \mathbf{x} 的预测: y_{i^*}



Voronoi图
(Voronoi Diagram)

最近邻可能出现的问题

✓ 如果出现平局(tie)?

- $d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$
- $y_i = y_j?$ $y_i \neq y_j?$

✓ 如果出现离群点(outlier)?

- K-近邻(kNN, k-nearest neighbor)规则
- 可能遇到的问题?

✓ 能做的多好?

- 当训练样本趋于无穷时($n \rightarrow \infty$), 最近邻的**错误率**最多是**最佳错误率**的两倍
- 有限样本(finite sample)时的结论尚不清楚

计算、存储代价(cost)

- ✓ 假设 $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 是欧式距离(Euclidean distance, ℓ_2 distance)
 - 其复杂度(complexity)是 $O(d)$
 - NN的复杂度 $O(nd)$
 - DHS 152页的复杂度是错的
 - K-NN的复杂度同样 $O(nd)$
 - 或者是 $O(nd) + O(n) + O(k)$, 但通常 k 较小, 可以忽略
 - 从 n 个数(距离)中选择 k 个最小的, 复杂度是?
- ✓ 考虑一下, 如果是ILSVRC, 需要多长时间, 多大的存储空间? 这是NN的主要问题
 - $n = 1,200,000$
 - $d = 262,144$

降低NN的计算、存储代价

- ✓ 近似最近邻(approximate nearest neighbor, ANN)
 - 不要求一定是距离最短的 k 个
 - 如第 k 个NN, 其距离是 d_k , 则ANN要求其选取的所有 k 个样例的距离 \hat{d} 满足 $\hat{d} \leq (1 + \epsilon)d_k$ 即可
 - 可以将kNN搜索(search、查找)速度提高几个数量级
- ✓ 二值哈希(binary hashing)
 - hash函数 f_i : 将 \mathbb{R}^d 分为两部分, 分别用 $f_i = 0, 1$ 表示
 - 设计 m 个hash函数 f_1, \dots, f_m , 每个 \mathbf{x} 表示为 m 个bit
 - $m \ll d$, 计算和存储大幅简化, 需要设计好的hash