模式识别

概率、统计、线性代数极简回顾

吴建鑫
南京大学人工智能学院，2023

目标

- ✓ 回忆掌握相关基本概念和最重要的定理

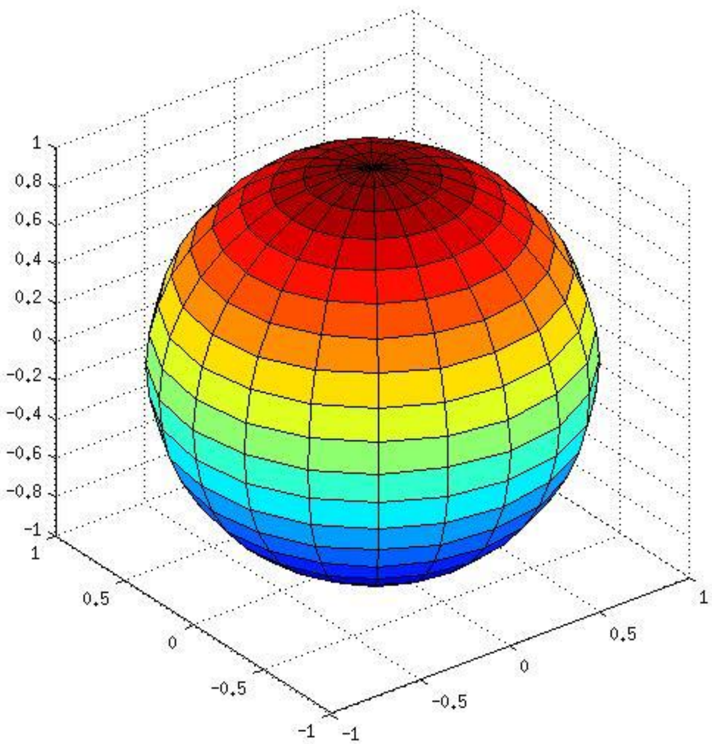
- ✓ 能够熟练应用提供的资源查表

- ✓ 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

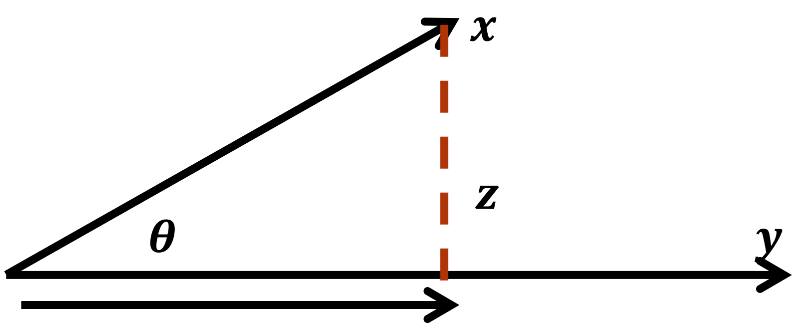
向量 (vector)

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



内积、角度、投影

- ✓ $\boldsymbol{x}$:$\|\boldsymbol{x}\|$决定长度，$\frac{\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|}$决定方向
- ✓ 向量之间的夹角(angle):
  - $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y} = \|\boldsymbol{x}\| \cdot \|\boldsymbol{y}\| \cdot \cos\theta$
  - $\left\|\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y}\right\| \leq \|\boldsymbol{x}\| \cdot \|\boldsymbol{y}\|$
- ✓ $\boldsymbol{x}$在$\boldsymbol{y}$上的投影(projection)
  - 方向：$\frac{\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{y}\|}$　　长度：$\|\boldsymbol{x}\| \cos\theta = \|\boldsymbol{x}\| \frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\| \cdot \|\boldsymbol{y}\|} = \frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{y}\|}$
  - 投影$\mathrm{proj}_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{x}$：$\frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{y}\|^2}\boldsymbol{y}$
  - $\mathrm{proj}_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{z}$
  - $\mathrm{proj}_{\boldsymbol{y}}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{z} = \boldsymbol{x}$



柯西-施瓦茨不等式

✓ Cauchy’s inequality

- $\left(\sum_{k=1}^{n} a_k b_k\right)^2 \le \left(\sum_{k=1}^{n} a_k^2\right)\left(\sum_{k=1}^{n} b_k^2\right)$

- 等号成立当且仅当存在固定实数c，使得$\forall k$，$a_k = cb_k$

✓ Schwarz's Inequality

- $\left[\int_a^b f(x)g(x)\mathrm{d}x\right]^2 \le \left[\int_a^b [f(x)]^2\mathrm{d}x\right]\left[\int_a^b [g(x)]^2\mathrm{d}x\right]$
- 等号成立当且仅当存在固定实数c，使得$\forall x \in [a\ b]$，$f(x) = cg(x)$ (不太准确)

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：$X^2 = XX, X^3 = XXX, \ldots$
- 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$\det(X)$
- $|X|$=$\left|X^T\right|$
- $|XY| = |X||Y|$
- $|\lambda \mathrm{X}| = \lambda^n|X| \quad (X: n \times n)$

✓ 方阵的逆矩阵(inverse matrix)

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

方阵的特征值、特征向量、迹

- 特征值(eigenvalue)和特征向量(eigenvector)
  - $A\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ $\quad A: n \times n$
  - λ:特征值 $\quad \boldsymbol{x}$: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)
  - $\mathrm{tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} = ??, \ \mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$

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$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$
  - 对应的特征向量记为$\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$
  - 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，$\operatorname{rank}(E) = n$.

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$\boldsymbol{\xi}_i$
- $X = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \xi_i \xi_i^T$
  - 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
  - $\forall \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \quad \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} = \sum_{i,j} x_i x_j A_{ij} > 0$
  - $\forall \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0} \quad \boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x} \geq 0$ 则A为半正定(positive semi-definite)
  - 分别记为$A \succ 0$或$A \succcurlyeq 0$
- $\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}$: 称为二次型(quadratic)
  - 这门课程会经常用到，一般满足$A \succcurlyeq 0$
- 等价关系
  - 1. $A \succ 0$ ($A \succcurlyeq 0$)
  - 2. 特征值全部为正数 (非负实数)

矩阵求导

- ✓ 假设一切求导的条件都满足（导数都存在）
- ✓ $\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial x}$是一个向量, $\left(\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial x}\right)_i = \frac{\partial a_i}{\partial x}$
- ✓ 对于矩阵， $\left(\frac{\partial A}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{\partial A_{ij}}{\partial x}$
- ✓ $\left(\frac{\partial x}{\partial \boldsymbol{a}}\right)_i = \frac{\partial x}{\partial a_i}$ $\left(\frac{\partial x}{\partial A}\right)_{ij} = \frac{\partial x}{\partial A_{ij}}$ $\left(\frac{\partial \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)_{ij} = \frac{\partial a_i}{\partial x_j}$

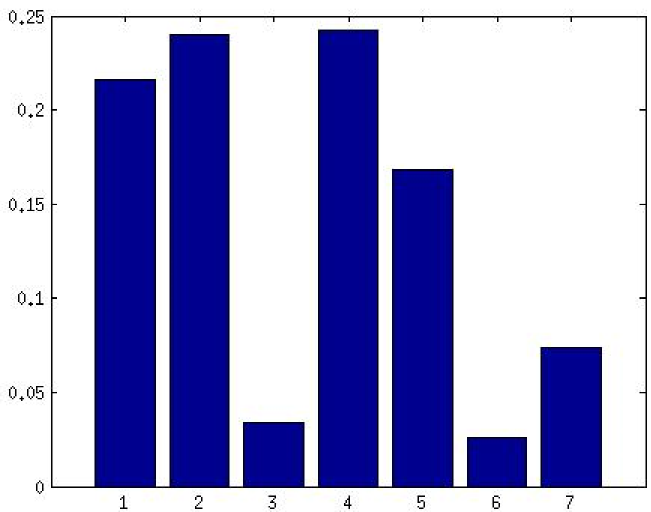
- ✓ 如何求导?
  - 能够查表并合理应用
  - The Matrix Cookbook 最好打印前两章上课时带着

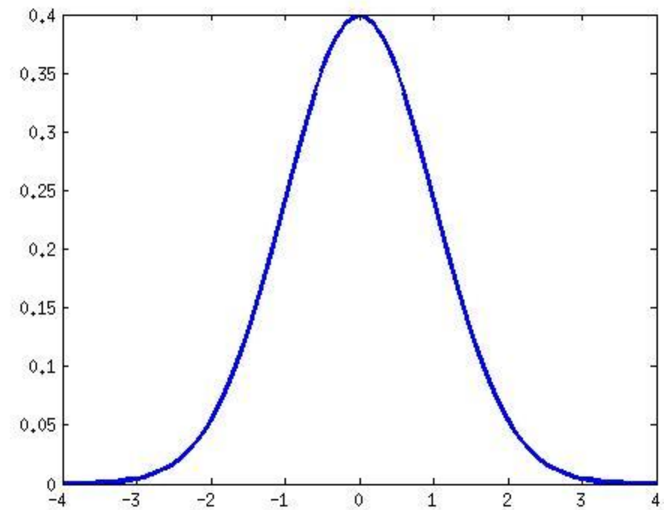
概率与统计

Probability & Statistics

随机变量(Random variable)

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





概率质量函数、概率密度函数

- ✓ （古典）离散(discrete)：
  - 可数的(countable)不相容的若干事件$x_1, x_2, \ldots$
  - $p(X = x_i) = c_i$ -- probability mass function （概率质量函数 pmf）
  - $c_i \geq 0$， $\sum_i c_i = 1$
- ✓ 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)
  - $p(x) \geq 0$, $\int_{-\infty}^{+\infty} p(x)\,\mathrm{d}x = 1$
- ✓ 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

分布函数(连续)

- ✓ Cumulative distribution function （cdf）
- ✓ $F(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^{x} p(x)\,\mathrm{d}x$
  - $F(-\infty) = 0 \leq F(x) \leq F(+\infty) = 1$
  - 非减性(non-decreasing)

  如果$x \leq y$，那么$F(x) \leq F(y)$
  - $P(X = x) =?$
  - $P(x_1 < x < x_2) = F(x_2) - F(x_1) = \int_{x_1}^{x_2} p(x)\,\mathrm{d}x$
- ✓ PDF和CDF的关系
  - $p(x) = F'(x)$

联合分布、条件分布、变换

- 联合分布(joint distribution)：$P(X = \boldsymbol{x})$
  - $p(\boldsymbol{x}) \geq 0 \qquad \int p(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x} = 1$
- 条件分布(conditional distribution): $P(X = x|Y = y)$
- $p(x, y) = p(y)p(x|y)$
- $p(x) = \int_y p(x, y)\mathrm{d}y$ --marginal（边际）分布
- 假设$x = g(y)$，那么

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

  - 如果$\boldsymbol{x}$和$\boldsymbol{y}$是向量？
  - 对g的具体要求见教材

多维分布的期望

- 假设有函数$f(\boldsymbol{x})$，在$\boldsymbol{x}$服从分布$p(\boldsymbol{x})$时：
- f的期望(Expectation)，记为$E[f(X)]$
  - $E[f(X)] = \sum_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) \cdot p(X = \boldsymbol{x})$，或
  - $E[f(X)] = \int f(\boldsymbol{x}) p(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x}$
  - 条件期望$E(f(\boldsymbol{x})|Y = \boldsymbol{y}) = \sum_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) \cdot p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{y})$
- f的方差(Variance,一维)或协方差(covariance，多维)
  - $Var(X) = E[(X - EX)^2]$
  - $Var(X) = E\left(X^2\right) - (EX)^2$ 向量形式时怎么样？
- 当$p(\boldsymbol{x})$和$f(\boldsymbol{x})$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：$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_n$
- ✓ 均值的估计estimation：

$$\overline{\boldsymbol{x}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i$$

- ✓ Covariance的估计

$$Cov(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^T$$

无偏估计unbiased estimation

$$Cov(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})(\boldsymbol{x}_i - \overline{\boldsymbol{x}})^T$$

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)
- $cov(X,Y) = E[(X - EX)(Y - EY)]$
- Pearson相关系数(Pearson’s correlation coefficient)：$-1 \leq \rho_{XY} \leq 1$

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

  - $\rho_{XY} = 0$，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

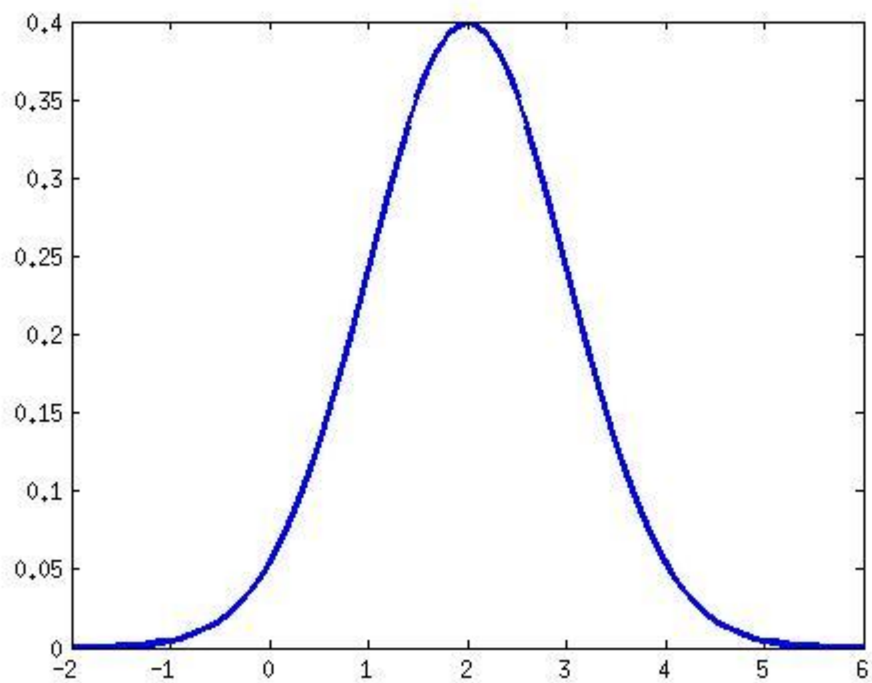
高斯分布

- ✓ 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，$P\left((X-\mu)^2 \geq k^2\right) \leq \frac{\sigma^2}{k^2}$或 $P(|X-\mu| > k) \leq \frac{\sigma^2}{k^2}$ $(k > 0)$
- 如果$k = 3$，这个界是多少？正态分布上的实际值是多少？(Matlab will help.)

多维高斯分布

- 一维：

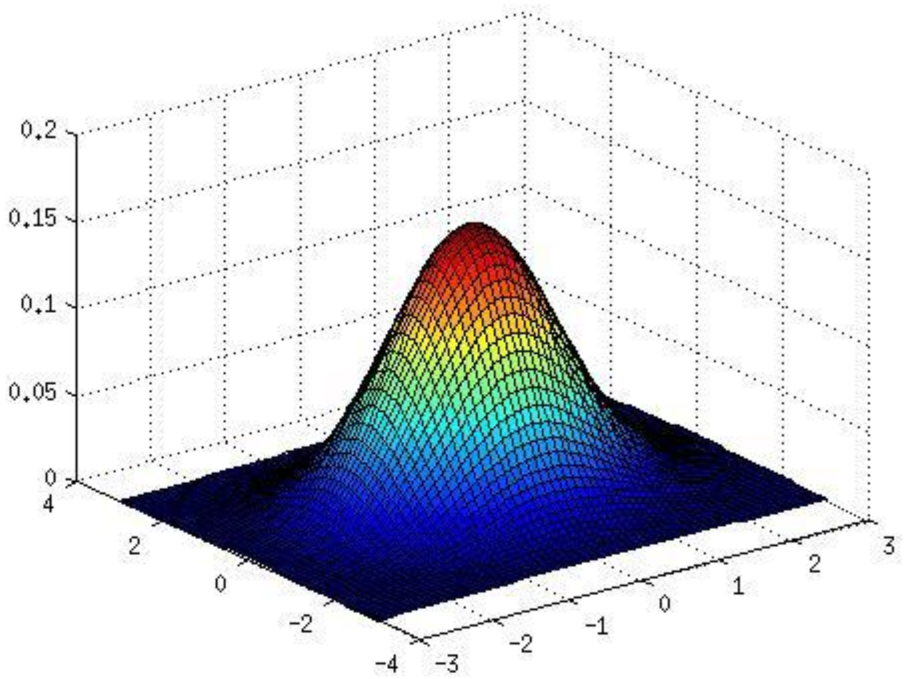
$$p(x)=(2\pi)^{-\frac{1}{2}}(\sigma^2)^{-\frac{1}{2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)(\sigma^2)^{-1}(x-\mu)\right\}$$

- 多维

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

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

多维高斯PDF示意图



- ✓ 图例中$\boldsymbol{\mu} = (0,0), \Sigma = I_2$
- ✓ 更多相关内容在PCA章节中讲授

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
  - $$\begin{matrix} c_{ii} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & c_{jj} \end{matrix}$$
  - 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：$\boldsymbol{x}_a | \boldsymbol{x}_b$ 还是高斯分布
  - 边际分布(margin distribution)：
    $p(\boldsymbol{x}_a) = \int p(\boldsymbol{x}_a, \boldsymbol{x}_b) \mathrm{d}\boldsymbol{x}_b$ 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？

- ✓ 进一步阅读：教材第13章，PRML 2.3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“正态分布”
    - 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）