熵$(entropy)$

在头脑中掌握第二定律比第一定律要困难得多。——克劳修斯

在信息论中又称为信息熵，是**随机变量不确定度**的度量（信息熵越小，信息越确定）；也是平均意义上描述随机变量所需的信息量的度量。

设X是一个离散型随机变量，其取值空间为$\mathcal{X}$。它的信息熵公式表示如下：

$$H(X) = -\sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) log\, p(x)$$

上式中，$p(x)$表示随机变量X的概率密度函数。将式子变形为$H(x) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) log \frac{1}{p(x)}$。所以熵又可以解释为随机变量$log \frac{1}{p(X)}$的期望值，即$E(log \frac{1}{p(X)})$。

熵的范围满足以下不等式：

$$0 \leqslant H(X) \leqslant log|X|$$

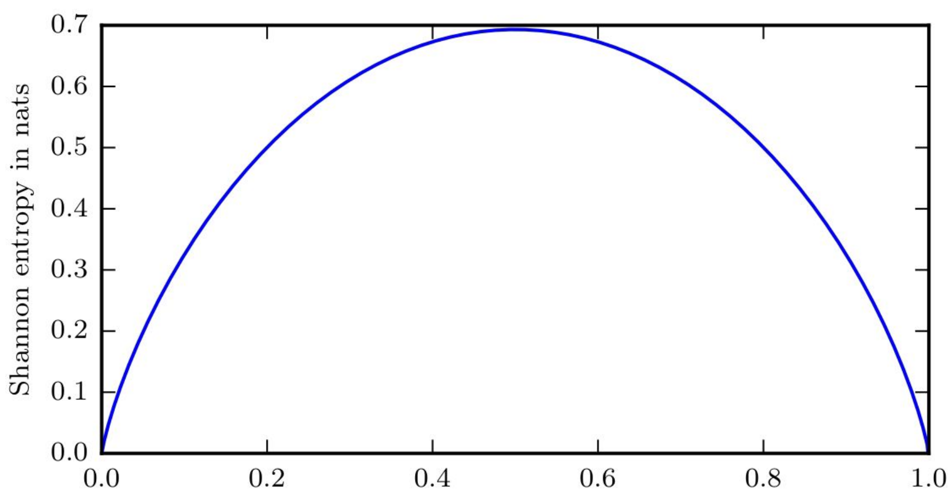
$|X|$是X取值个数，当且仅当X的分布是均匀分布时右边等号成立。

设

$$X = \begin{cases} 1 & \text{概率为}p \\ 0 & \text{概率为}1-p \end{cases}$$

则

$$H(X) = -plogp - (1-p)log(1-p) \overset{def}{=} H(p)$$



联合熵和条件熵

联合熵

我们将熵的定义推广至**两个随机变量**的情形。由于(X,Y)可以视为**单个向量值**随机变量，所以定义并无新鲜之处。对于服从联合分布为$p(x,y)$的一对离散型随机变量(X,Y)，其联合熵表示如下：

$$H(X,Y) = -\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(x,y) logp(x,y)$$

同样，我们将其表示成期望的形式：

$$H(X,Y) = -E\left(log\, p(X,Y)\right)$$

条件熵

我们也可以定义**一个随机变量在给定另一个随机变量下**的条件熵：它是条件概率分布的熵关于起条件作用的那个随机变量的**期望值**（注意这是人为的定义而已）。

若$(X,Y)\sim p(x,y)$，条件熵$H(Y|X)$定义为：

$$\begin{aligned} H(Y|X) &= \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)H(Y|X=x) \\ &= -\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(y|x)log(p(y|x)) \\ &= -\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(x,y)log(p(y|x)) \end{aligned}$$

链式法则

一对随机变量的**联合熵**等于其中一个随机变量的**熵**加上另一个随机变量的**条件熵**。

$$H(X,Y) = H(X) + H(Y|X)$$

证明如下：

$$\begin{aligned} H(X,Y) &= -\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(x,y)log(p(x,y)) \\ &= -\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(x,y)log\left(p(x)p(y|x)\right) \\ &= -\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(x,y)log(p(x)) - \sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(x,y)logp(y|x) \\ &= -\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log(p(x)) - \sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}} p(x,y)log(p(y|x)) \\ &= H(X) + H(Y|X) \end{aligned}$$

它所表达的物理含义是：对两个随机变量的随机系统，我们可以先观察一个随机变量获取信息量，观察完后，我们可以在拥有这个信息量的基础上观察第二个随机变量的信息量。

- **例子：**

Y\X	1	2	3	4
1	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{32}$
2	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{8}$	$\frac{1}{32}$	$\frac{1}{32}$
3	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{16}$	$\frac{1}{16}$
4	$\frac{1}{4}$	0	0	0

$$\begin{aligned}H(X) &= -\sum_{x\in\mathcal{X}}^{n} p(x)log\,p(x)\\ &= -\left(\frac{1}{2}\times log\frac{1}{2}+\frac{1}{4}\times log\frac{1}{4}+\frac{1}{8}\times log\frac{1}{8}+\frac{1}{8}\times log\frac{1}{8}\right)\\ &= -(-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}-\frac{3}{8}-\frac{3}{8})\\ &= \frac{7}{4}(bit)\end{aligned}$$

同理可得：$H(Y)=2(bit)$。

并且：

$$\begin{aligned}H(X|Y)) &= \sum_{y\in\mathcal{Y}} p(y)H(X|Y=y)\\ &= \frac{1}{4}H(\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{8},\frac{1}{8})+\frac{1}{4}H(\frac{1}{4},\frac{1}{2},\frac{1}{8},\frac{1}{8})+\frac{1}{4}H(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})+\frac{1}{4}H(1,0,0,0)\\ &= \frac{1}{4}\times\left(\frac{7}{4}+\frac{7}{4}+2+0+\right)\\ &= \frac{11}{8}(bit)\end{aligned}$$

值得说明的是，$H(Y|X)\neq H(X|Y)$，但$H(X)-H(X|Y)=H(Y)-H(Y|X)$。

相对熵（KL散度）

它是**同一个随机变量**的两个**不同概率分布**之间距离的度量。在统计学上，对应的是**似然比的对数期望。**
举例来说：已知随机变量的真是分布p，可以构造平均长度为$H(p)$的码。但是如果我们此时采用了针对分布q的编码，那么在平均意义上就需要$H(p)+D(p||q)$比特来描述这个随机变量。

其定义为：

$$D(p||q)=\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log\frac{p(x)}{q(x)}=\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log(p(x))-\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log(q(x))=E_p\left(log\frac{p(X)}{q(X)}\right)$$

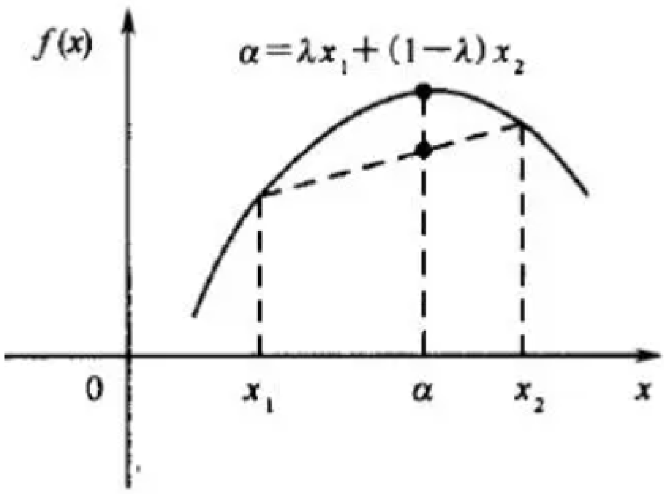
- KL散度越小，它们之间的距离越近。我们可以看出KL散度由p所代表的随机变量自己的**熵**与q在p上的**期望**共同决定。
- KL散度总是**非负的**，也满足**同一性**（当且仅当$p=q$时为0，即仅当两个随机分布完全一样时，相对熵为0）。

但是KL散度并**不对称**，即一般情况下$D(p||q)\neq D(q||p)$；也**不满足三角不等式**，因此其并非两个分布间的真正距离。然而，将其视为分布之间的”距离“往往很有用。

- **证明其非负性：**

  $$D(p\|q)=\sum_{x\in\mathcal{X}}p(x)log\frac{p(x)}{q(x)}=-\sum_{x\in\mathcal{X}}p(x)log\frac{q(x)}{p(x)}\geqslant -log\sum_{x\in\mathcal{X}}p(x)\frac{q(x)}{p(x)}=-log1=0$$

  其中用到了log**函数为凹函数和**$Jensen$**不等式**，所以$E(log(x))\leqslant log(E(x))$。



- **例子：**

  设$\mathcal{X}=\{0,1\}$，考虑$\mathcal{X}$上两个分布p和q。设$p(0)=1-r,p(1)=r$和$q(0)=1-s,q(1)=s$，则

  $$D(p\|q)=(1-r)log\frac{1-r}{1-s}+rlog\frac{r}{s}$$

  以及

  $$D(q\|p)=(1-s)log\frac{1-s}{1-r}+slog\frac{s}{r}$$

  显然如果$r=s$，那么$D(p\|q)=D(q\|p)=0$。若$r=\frac{1}{2},s=\frac{1}{4}$，可以计算得到

  $$D(p\|q)=\frac{1}{2}log\frac{\frac{1}{2}}{\frac{3}{4}}+\frac{1}{2}log\frac{\frac{1}{2}}{\frac{1}{4}}=0.2075(bit)$$

  而

  $$D(p\|q)=\frac{3}{4}log\frac{\frac{3}{4}}{\frac{1}{2}}+\frac{1}{4}log\frac{\frac{1}{4}}{\frac{1}{2}}=0.1887(bit)$$

互信息

一个随机变量包含另一个随机变量的度量。同样可以理解为，**互信息也是在给定另一随机变量知识的条件下，原随机变量不确定度的缩减量。**考虑两个随机变量X和Y，则互信息$I(X;Y)$为联合分布$p(x,y)$和乘积分布$p(x)p(y)$之间的**相对熵**，即

$$I(X;Y)=\sum_{x\in\mathcal{X}}\sum_{y\in\mathcal{Y}}p(x,y)log\frac{p(x,y)}{p(x)p(y)}=D(p(x,y)\|p(x)p(y))$$

熵与互信息的关系

$$
\begin{aligned}
I(X;Y) &= \sum_{x,y} p(x,y)log\frac{p(x,y)}{p(x)p(y)} \\
&= \sum_{x,y} p(x,y)log\frac{p(x|y)}{p(x)} \\
&= \sum_{x,y} p(x,y)logp(x|y) - \sum_{x,y} p(x,y)logp(x) \\
&= H(X) - H(X|Y)
\end{aligned}
$$

由此证明出互信息是在给定Y知识的条件下X的不确定度的缩减量。显然取值范围在0到$min(H(X), H(Y))$之间。

同理，我们可以证明出$I(X;Y) = H(Y) - H(Y|X)$。因此X含有Y的信息量等同于Y含有X的信息量。再者，由之前的$H(X,Y) = H(X) + H(Y|X)$，可以得到$I(X;Y) = H(X) + H(Y) - H(X,Y)$。

特殊情况$I(X;X) = H(X) - H(X|X) = H(X)$。所以，熵有时又被称作**自信息。**

交叉熵

上面我们讨论过KL散度可以表示两个随机分布之间距离的度量，那么还要交叉熵做什么？

我们由KL散度的公式变形可以得到：

$$D(p||q) = \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log(p(x)) - \sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log(q(x)) = -H(p(x)) + \left[-\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log(q(x))\right]$$

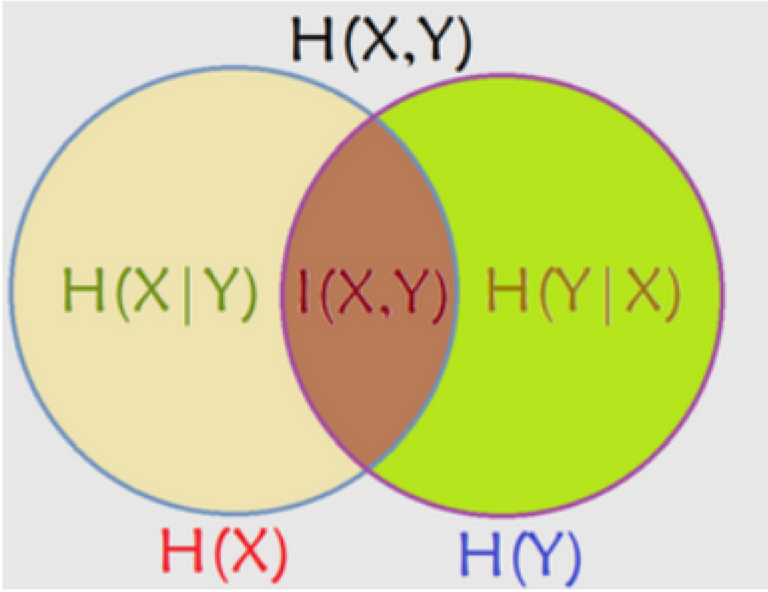
（KL散度=交叉熵−熵）后半部分就是我们的**交叉熵**：

$$H(p,q) = -\sum_{x\in\mathcal{X}} p(x)log(q(x))$$

显然，对自己求交叉熵就是熵。

在机器学习中，我们常常使用KL散度来评估$predict$和$label$之间的差别，但是由于KL散度的前半部分是一个**常量**（**因为训练数据的分布是确定的，与模型的参数无关，所以梯度下降求导时，$\nabla H(P,Q) = \nabla D_{KL}(P||Q)$，即最小化交叉熵与最小化$KL$散度是一样的，也即我们用$p(x)$用来描述真实分布，而$q(x)$来描述模型预测的分布**），所以我们常常将后半部分的交叉熵作为损失函数，其实二者是一样的。

交叉熵可以用于计算“学习模型的分布”与“训练数据分布”之间的不同。当交叉熵最低时(等于训练数据分布的熵)，我们学到了“最好的模型”。


H(X,Y)
H(X|Y)
I(X,Y)
H(Y|X)
H(X)
H(Y)

参考文献

1. 《熵：一种新的世界观》
2. 《溯源探幽：熵的世界》
3. 《信息论基础》