第二章 基础知识

概率与统计基础

2.1 随机变量与常见分布

2.1.1 随机变量的定义

定义
随机变量就是用数字来表示随机现象结果的“变量”。
它把每次实验的结果，按照一定的规则，映射成一个数字。

公式表达
如果 Ω 是所有可能结果组成的集合（样本空间），那么随机变量 X 就是一个函数：

$$X : \Omega \to \mathbb{R}$$

也就是说，每个实验结果 $\omega \in \Omega$，都对应一个数 $X(\omega)$。

举例说明

- 抛骰子：设 $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$，随机变量 $X(\omega) = \omega$，表示抛出点数。
- 抛硬币：$\Omega = \{正面, 反面\}$，可以定义 $X(正面) = 1$，$X(反面) = 0$。

类型

- **离散型**：随机变量只能取有限或可数多个值，如骰子点数

$$X \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$$

- **连续型**：随机变量可以取某个区间内任意实数，如温度

$$X \in [-40, 50]$$

总结
随机变量就是用一个函数，把随机现象的结果“翻译”成数字，方便用数学方法来分析。

2.1.2 概率分布与概率函数

离散型

概率质量函数（PMF）
描述随机变量 X 取某个具体值 x 的概率：

$$p_X(x) = P(X = x), \quad \sum_x p_X(x) = 1$$

即所有可能取值的概率加起来等于1。

连续型

概率密度函数（PDF）
描述随机变量 X 在某个点附近取值的“密度”，而不是具体概率：

$$p_X(x) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} p_X(x)dx = 1$$

注意：对于连续型随机变量，$P(X = x) = 0$，只有区间概率有意义，如 $P(a < X < b) = \int_a^b p_X(x)dx$
。

分布函数（CDF）

定义
无论离散还是连续，分布函数都定义为：

$$F_X(x) = P(X \leq x)$$

即随机变量 X 取值小于等于 x 的概率。

分布函数的性质

（1） **非减性（单调性）**

$$x_1 < x_2 \implies F_X(x_1) \leq F_X(x_2)$$

解释：随着 x 增大，$X \leq x$ 的事件只会变“更大”或“不变”，所以概率不会减少。

（2） **取值范围与极限**

$$F_X(-\infty) = 0, \quad F_X(+\infty) = 1$$

解释：

- 当 x 趋向负无穷，$X \leq x$ 不可能发生，所以概率为0。
- 当 x 趋向正无穷，$X \leq x$ 一定发生，所以概率为1。
- 因此，$F_X(x)$ 的取值范围是 $[0, 1]$。

（3） **右连续性**

$$\lim_{h \to 0^+} F_X(x+h) = F_X(x)$$

解释：分布函数在每个点都是右连续的，即从右侧逼近时，值不会跳变。

（4） **离散型与连续型的区别**

- **离散型**：分布函数是“阶梯状”的，每遇到一个可取值就跳一下，跳跃的高度就是该点的概率。

$$P(X = x) = F_X(x) - F_X(x^-)$$

- **连续型**：分布函数是“平滑曲线”，没有跳跃。

$$p_X(x) = \frac{d}{dx} F_X(x)$$

  即概率密度函数是分布函数的导数。

（5） **区间概率的计算**

- 对任意 $a < b$，有

$$P(a < X \leq b) = F_X(b) - F_X(a)$$

- 对离散型，$P(X = x) = F_X(x) - F_X(x^-)$（$F_X(x^-)$ 表示左极限）。

2.1.3 常见离散分布

1）伯努利分布（Bernoulli distribution）

由来

伯努利分布是最简单的离散概率分布，由瑞士数学家 **雅各布·伯努利** 在 17 世纪提出。它描述了一次实验中只有两种可能结果的情形：**成功**（记为 1）或**失败**（记为 0）。
例如：一次抛硬币，正面为 1，反面为 0。

定义与公式
若随机变量 X 取值为 1 的概率为 p，取值为 0 的概率为 $1-p$，则：

$$P(X=x)=p^x(1-p)^{1-x},\quad x\in\{0,1\}$$

记作：

$$X\sim \mathrm{Bernoulli}(p)$$

性质

- **期望**：

$$E[X]=p$$

- **方差**：

$$\mathrm{Var}(X)=p(1-p)$$

- **取值范围**：$x\in\{0,1\}$
- **对称性**：当 $p=0.5$ 时分布对称。

典型应用

- 抛硬币（正面/反面）
- 产品合格（1）/不合格（0）
- 用户是否点击广告
- 病人是否康复

2） 二项分布（Binomial distribution）

由来
二项分布是对伯努利分布的推广：如果我们进行 n 次**相互独立且成功概率相同**的伯努利试验，记录成功次数，就得到二项分布。
由二项式定理得名，因为它的概率质量函数形式直接来源于二项展开式。

定义与公式
设 X 为 n 次独立试验中成功的次数，单次成功概率为 p，则：

$$P(X=k)=\binom{n}{k}p^k(1-p)^{n-k},\quad k=0,1,\ldots,n$$

记作：

$$X\sim \mathrm{Binomial}(n,p)$$

性质

- **期望**:

$$E[X] = np$$

- **方差**:

$$\mathrm{Var}(X) = np(1-p)$$

- **取值范围**: $k \in \{0, 1, \dots, n\}$
- 当 $n = 1$ 时，二项分布退化为伯努利分布。

典型应用

- 10 次抛硬币正面出现次数
- 抽检 n 件产品合格品数量
- 考试中答对题目数（每题独立且成功概率相同）
- 网络中数据包成功传输数

3） 泊松分布（Poisson distribution）

由来
泊松分布由法国数学家 **西蒙·德尼·泊松** 在 19 世纪提出，最初用于研究稀有事件在固定时间或空间区间内发生的次数。
它可以看作**二项分布的极限**：当试验次数 n 很大、单次成功概率 p 很小，且 $\lambda = np$ 固定时，二项分布趋近于泊松分布。

定义与公式
若单位时间（或单位面积）内事件的平均发生次数为 $\lambda > 0$，且事件独立发生，则:

$$P(X = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

记作:

$$X \sim \mathrm{Poisson}(\lambda)$$

性质

- **期望**:

$$E[X] = \lambda$$

- **方差**:

$$\mathrm{Var}(X) = \lambda$$

- **无记忆性**：泊松过程的增量独立且平稳。
- **近似性质**：当 n 大、p 小且 $np = \lambda$ 时，$\mathrm{Binomial}(n, p) \approx \mathrm{Poisson}(\lambda)$。

典型应用

- 一分钟内呼入电话次数
- 一天内公交到站次数
- 每秒网页访问次数
- 放射性粒子衰变计数
- 工厂生产线上的缺陷品出现次数

4） 三者关系总结

分布	来源/背景	参数	适用场景	特点
伯努利分布	单次二元试验	p	只有成功/失败两种结果的单次试验	最基本的离散分布
二项分布	n 次独立伯努利试验成功次数	n, p	固定次数重复试验，统计成功数	伯努利分布的推广
泊松分布	稀有事件在固定区间内的发生次数	λ	时间/空间内的随机计数事件	二项分布的极限情形

2.1.4 常见连续分布

1） **均匀分布** $X \sim U(a, b)$

$$f(x) = \frac{1}{b-a}, \quad a \le x \le b$$

- **含义**：在区间 $[a, b]$ 上每个值出现的概率都一样。
- **典型应用**：随机抽取一个时间点、彩票号码、仿真中的“等概率噪声”等。
- **期望/方差**：$E[X] = \frac{a+b}{2}$、$\mathrm{Var}(X) = \frac{(b-a)^2}{12}$

2） **正态分布（高斯分布）** $X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$

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

- **含义**：数据围绕均值 μ 呈“钟型”分布，标准差 σ 决定分布宽度。
- **典型应用**：身高、考试分数、测量误差、信号噪声等大量自然和社会现象。
- **期望/方差**：$E[X] = \mu$、$\mathrm{Var}(X) = \sigma^2$

3） **指数分布** $X \sim \mathrm{Exp}(\lambda)$

$$f(x) = \lambda e^{-\lambda x}, \quad x \geq 0$$

- **含义**：描述“下一次事件”要等多久，具有无记忆性。
- **典型应用**：灯泡寿命、排队等待时间、电子元件失效时间、地震间隔时间等。
- **期望/方差**：$E[X] = \frac{1}{\lambda}$、$\mathrm{Var}(X) = \frac{1}{\lambda^2}$

4） **卡方分布** χ_k^2

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{k} Z_i^2$$

其中 Z_i 是独立标准正态分布。

- **含义**：若干正态变量平方和的分布。
- **典型应用**：假设检验（如卡方检验）、方差分析、置信区间估计等统计推断中经常出现。
- **期望/方差**：$E[X] = k$、$\mathrm{Var}(X) = 2k$

2.1.5 例题

例题2.1（二项分布）：

> 某种药物的有效率为80%。现有5名病人接受治疗，假设每人是否治愈相互独立。
> 问：至少有4人治愈的概率是多少？

解析：
设“治愈”为一次伯努利试验，成功概率 $p = 0.8$，总共 $n = 5$ 次。
X 表示治愈人数，$X \sim \mathrm{Binomial}(5, 0.8)$。

至少4人治愈，即4人或5人治愈：

$$P(X \geq 4) = P(X = 4) + P(X = 5)$$

$$P(X = 4) = \binom{5}{4}(0.8)^4(0.2)^1 = 5 \times 0.4096 \times 0.2 = 0.4096$$

$$P(X=5)=\binom{5}{5}(0.8)^5(0.2)^0=1\times 0.32768\times 1=0.32768$$

$$P(X\geq 4)=0.4096+0.32768=0.73728$$

答： 至少有4人治愈的概率约为0.737。

例题2.2（泊松分布）：

> 某路口平均每小时发生2起交通事故，假设事故发生服从泊松分布。
> 问：某小时内恰好发生3起事故的概率是多少？

解析：
设 X 表示一小时内事故数，$X\sim\mathrm{Poisson}(2)$。

$$P(X=3)=\frac{2^3e^{-2}}{3!}=\frac{8\times e^{-2}}{6}\approx\frac{8\times 0.1353}{6}\approx 0.1804$$

答： 恰好3起事故的概率约为0.18。

例题2.3（正态分布）：

> 某批产品长度服从正态分布，均值为100mm，标准差为2mm。
> 问：抽到一件产品，其长度在98mm到102mm之间的概率是多少？

解析：
设 $X\sim\mathcal{N}(100,2^2)$。

标准化：

$$P(98<X<102)=P\left(\frac{98-100}{2}<Z<\frac{102-100}{2}\right)=P(-1<Z<1)$$

查标准正态分布表：

$$P(-1<Z<1)=\Phi(1)-\Phi(-1)=0.8413-0.1587=0.6826$$

答： 产品长度在98mm到102mm之间的概率约为68.3%。

2.2 随机向量及协方差矩阵

2.2.1 随机向量与联合分布

随机向量

$$\mathbf{X} = [X_1, X_2, \dots, X_n]^T$$

每个分量 X_i 都是随机变量，整个向量描述多个随机变量的联合行为。

联合分布

- **离散型**：联合概率质量函数 $p_{\mathbf{X}}(x_1, \dots, x_n)$
- **连续型**：联合概率密度函数 $f_{\mathbf{X}}(x_1, \dots, x_n)$

边缘分布
通过对联合分布对其他变量求和（离散）或积分（连续），得到单个变量的分布。例如：

$$f_X(x) = \int f_{X,Y}(x, y) dy$$

条件分布
在已知某些变量取值的条件下，其他变量的分布：

$$f_{X|Y}(x|y) = \frac{f_{X,Y}(x, y)}{f_Y(y)}$$

2.2.2 期望向量与协方差矩阵

期望（数学期望）

- **离散型随机变量**：

  $$E[X] = \sum_x x\, p(x)$$

  其中 $p(x)$ 是概率质量函数。
- **连续型随机变量**：

  $$E[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x\, f(x)\, dx$$

  其中 $f(x)$ 是概率密度函数。
- **性质**：

i. **线性性**：$E[aX+bY]=aE[X]+bE[Y]$
ii. **单调性**：若 $X\le Y$ 则 $E[X]\le E[Y]$
iii. **Fubini–Tonelli 定理**：
   - **Tonelli 定理**（非负情形）：$f(x,y)\ge 0$ 时积分/求和次序可交换，结果可能为无穷大。
   - **Fubini 定理**（绝对可积情形）：$\iint |f|<\infty$ 时可交换次序，结果有限。

期望向量

$$E[\mathbf{X}]=\begin{bmatrix}E[X_1]\\ \vdots \\ E[X_n]\end{bmatrix}$$

方差

$$\mathrm{Var}(X)=E[(X-\mu)^2]=E[X^2]-(E[X])^2$$

- **性质**：
  i. $\mathrm{Var}(aX+b)=a^2\mathrm{Var}(X)$
  ii. $\mathrm{Var}(X)\ge 0$

协方差

$$\mathrm{Cov}(X,Y)=E[(X-E[X])(Y-E[Y])]$$

- **性质**：
  i. $\mathrm{Cov}(X,X)=\mathrm{Var}(X)$
  ii. $\mathrm{Cov}(X,Y)=\mathrm{Cov}(Y,X)$
  iii. $\mathrm{Cov}(aX+b,Y)=a\,\mathrm{Cov}(X,Y)$

协方差矩阵

$$\Sigma_{\mathbf{X}}=E\left[(\mathbf{X}-\mu)(\mathbf{X}-\mu)^T\right]$$

其中 $\mu=E[\mathbf{X}]$ 是期望向量，$\Sigma_{ij}=\mathrm{Cov}(X_i,X_j)$。

相关系数

$$\rho_{XY}=\frac{\mathrm{Cov}(X,Y)}{\sigma_X\sigma_Y},\quad -1\le\rho_{XY}\le 1$$

2.2.3 协方差矩阵的性质

1） 对称性

$$\Sigma = \Sigma^T$$

- 任意 i, j，有 $\Sigma_{ij} = \Sigma_{ji}$。

2） 半正定性

$$\mathbf{a}^T \Sigma \mathbf{a} \geq 0$$

- 任意线性组合的方差非负，协方差矩阵的特征值不小于0。

3） 对角线元素为方差

$$\Sigma_{ii} = \mathrm{Var}(X_i)$$

4） 正定性

- 严格正定表示分量不存在线性相关；特征值为0表示存在线性关系。

5） 迹与方差总和

$$\mathrm{Tr}(\Sigma) = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{Var}(X_i)$$

2.2.4 例题讲解

例题2.4
二维向量 (X, Y) 均值零，协方差矩阵
$\Sigma = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}$，求 $\mathrm{Var}(X+Y)$。

解：

$$\mathrm{Var}(X+Y) = 2 + 3 + 2 \times 1 = 7$$

例题2.5
已知二维随机向量 (X, Y) 的协方差矩阵为

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 9 \end{bmatrix}$$

求 $\mathrm{Cov}(X, 2Y)$ 和 $\mathrm{Var}(X - 2Y)$。

解:

$$\operatorname{Cov}(X,2Y)=2\operatorname{Cov}(X,Y)=2\times(-2)=-4$$

$$\operatorname{Var}(X-2Y)=\operatorname{Var}(X)+4\operatorname{Var}(Y)-4\operatorname{Cov}(X,Y)=4+36+8=48$$

例题2.6
三维随机向量 $\mathbf{X}=(X_1,X_2,X_3)^T$ 的协方差矩阵为

$$\Sigma=\begin{bmatrix}1 & 0.5 & 0\\ 0.5 & 2 & 1\\ 0 & 1 & 3\end{bmatrix}$$

求 $\operatorname{Var}(X_1+X_2+X_3)$。

解:

$$\operatorname{Var}(X_1+X_2+X_3)=\sum_{i=1}^{3}\operatorname{Var}(X_i)+2\sum_{1\le i<j\le 3}\operatorname{Cov}(X_i,X_j)$$

$$=1+2+3+2\times[0.5+0+1]=6+3=9$$

例题2.7
掷一标准骰子，令 X 为点数，求方差。

解:
均值:

$$\mu=\frac{1+2+3+4+5+6}{6}=3.5$$

平方期望:

$$E[X^2]=\frac{1^2+2^2+3^2+4^2+5^2+6^2}{6}=\frac{91}{6}$$

方差：

$$\mathrm{Var}(X) = \frac{91}{6} - (3.5)^2 = \frac{35}{12} \approx 2.92$$

例题2.8
抛两枚硬币，设 X 为正面数，求 $E[X]$ 和 $\mathrm{Var}(X)$。

解：
概率分布：
$P(X=0)=1/4$，$P(X=1)=1/2$，$P(X=2)=1/4$

期望：

$$E[X] = 0 \times \frac{1}{4} + 1 \times \frac{1}{2} + 2 \times \frac{1}{4} = 1$$

平方期望：

$$E[X^2] = 0 + \frac{1}{2} + 1 = \frac{3}{2}$$

方差：

$$\mathrm{Var}(X) = \frac{3}{2} - 1^2 = \frac{1}{2}$$

例题2.9
已知随机变量 X 取值 1 和 -1，各概率均为 0.5，令 $Y = 2X + 3$，求 $E[Y]$ 和 $\mathrm{Var}(Y)$。

解：

$$E[X] = 0.5 \times 1 + 0.5 \times (-1) = 0$$

$$\mathrm{Var}(X) = 0.5 \times (1-0)^2 + 0.5 \times (-1-0)^2 = 1$$

$$E[Y] = 2E[X] + 3 = 3$$

$$\mathrm{Var}(Y) = 2^2 \times \mathrm{Var}(X) = 4$$

2.3 条件概率、独立性、贝叶斯公式

条件概率：

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

独立性：

$P(A \cap B) = P(A)P(B)$
随机变量 X, Y 独立：$f_{X,Y}(x,y) = f_X(x)f_Y(y)$

全概率公式：

若 $\{B_i\}$ 构成完备事件组：

$$P(A) = \sum_i P(A|B_i)P(B_i)$$

贝叶斯公式：

$$P(B_i|A) = \frac{P(A|B_i)P(B_i)}{\sum_j P(A|B_j)P(B_j)}$$

核心思想：**先验 + 似然 ⇒ 后验**。

例题2.10
某疾病检测试剂，阳性判病。已知患病率 1%，试剂灵敏度 0.99，假阳率 0.05。求阳性者真患病的概率。

解：
A=患病，B=阳性。
$P(B|A) = 0.99, P(B|\bar{A}) = 0.05, P(A) = 0.01$

$$P(A|B) = \frac{0.99 \cdot 0.01}{0.99 \cdot 0.01 + 0.05 \cdot 0.99} \approx 0.167$$

启示：低患病率下，即便检测精度高，阳性预测值也可能不高。

2.4 条件期望与最小均方误差（MMSE）

2.4.1 条件期望：概念与定义

1） 基本概念

条件期望是概率论中的核心概念，表示在给定某些信息条件下，随机变量的期望值。对于随机变量 Y 和 X，条件期望 E[Y|X] 表示在已知 X 取值的情况下，Y 的平均值。

2） 数学定义

$$E[Y|X] = \int y f_{Y|X}(y|X) dy$$

其中 $f_{Y|X}(y|x)$ 是在给定 X = x 时 Y 的条件概率密度函数。

3） 重要性质

- **线性性**：$E[(aY + bZ)|X] = aE[Y|X] + bE[Z|X]$
- **迭代期望定律**：$E[E[Y|X]] = E[Y]$
- **独立性**：若 Y 与 X 独立，则 $E[Y|X] = E[Y]$

2.4.2 最小均方误差（MMSE）准则

1） 基本思想

MMSE是一种最优化准则，旨在找到使预测误差平方的期望值最小的估计器。对于基于X预测Y的问题，我们寻找函数$g(X)$使得：

$$E[(Y - g(X))^2]$$

最小化。

2） MMSE定理

定理：在所有关于X的函数$g(X)$中，最小化均方误差

$$E[(Y - g(X))^2]$$

的最优函数是条件期望：

$$g^*(X) = E[Y|X]$$

2.4.3 二者关系

1） 两种视角

条件期望和MMSE估计器不是两个独立概念，而是对"最优预测"问题的两种表述：

- **概率视角**：条件期望 $E[Y|X]$ 描述了给定X时Y的平均行为
- **优化视角**：MMSE估计器提供了最小化预测误差的具体方法

2） 条件期望是最优估计

直观解释
将均方误差分解为：

$$E[(Y-g(X))^2] = E[(Y-E[Y|X])^2] + E[(E[Y|X]-g(X))^2]$$

- 第一项：不可减少的误差（Y自身随机性）
- 第二项：估计器不准确导致的误差

最小化整体误差只需令第二项为零，即选择 $g(X) = E[Y|X]$

几何解释
在希尔伯特空间框架下：

- 随机变量可视为向量
- 所有g(X)构成线性子空间
- 条件期望 E[Y|X] 是Y在该子空间上的正交投影
- 正交投影正是到子空间距离最短的点

2.4.4 实例

例题2.11： 线性模型

模型
考虑 Y = 2X + N，其中：

- X ~ N(0,1)（标准正态分布）
- N ~ N(0,1)（标准正态分布）
- X 与 N 相互独立

求解 E[Y|X]：

$$E[Y|X] = E[2X + N|X] = 2E[X|X] + E[N|X] = 2X + E[N] = 2X$$

这里利用了：

1. 已知X时，X的條件期望为自身
2. X与N独立，故$E[N|X] = E[N] = 0$

误差分析
最优估计的均方误差为：

$$E[(Y - 2X)^2] = E[N^2] = 1$$

这是任何基于X的预测都无法超越的性能下界。

2.5 参数空间与样本空间、似然函数的概念

2.5.1 参数空间与样本空间

在统计建模中，**参数空间**和**样本空间**是两个基础且密切相关的概念，它们分别对应模型中“未知的部分”和“观测到的部分”。

1）样本空间 Ω

- **定义**：样本空间是一次试验或观测中所有可能结果的集合。
- **举例**：
  - 离散情况：掷一枚硬币，样本空间为 $\Omega = \{\text{正}, \text{反}\}$。
  - 连续情况：测量某地气温，样本空间可为 $\mathbb{R}$ 或某个区间 $[a, b]$。
- **数学描述**：在概率空间 $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ 中，Ω 表示所有基本事件的集合。

2）参数空间 Θ

- **定义**：参数空间是统计模型中未知参数所有可能取值的集合。
- **举例**：
  - 伯努利分布中的成功概率 p，其参数空间为 $\Theta = [0, 1]$。
  - 正态分布的参数为 (μ, σ^2)，参数空间为 $\Theta = \mathbb{R} \times (0, +\infty)$。

3）区别与联系

- **区别**：
  - 样本空间关注的是“数据可能如何出现”；
  - 参数空间关注的是“模型可能如何设定”。
- **联系**：
  - 参数 $\theta \in \Theta$ 决定概率分布 $p_\theta(x)$ 的形式；
  - 样本 $x \in \Omega$ 用于估计或推断参数 θ 的值。

2.5.2 似然函数（Likelihood Function）

1）动机

在统计推断中，我们往往已经拥有观测数据，而模型参数未知。**似然函数**提供了一种基于数据“反推”参数合理取值的方法。

2）定义

设观测样本为 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$，概率模型为 p_θ（离散）或 f_θ（连续）。似然函数定义为：

$$L(\theta; x) = \begin{cases} p_\theta(x) & \text{（离散情形）} \\ f_\theta(x) & \text{（连续情形）} \end{cases}$$

- **注意**：
  - 似然函数是参数 θ 的函数，数据 x 视为固定；
  - 其数值大小反映在给定数据下，不同参数值的“合理性”或“解释力”。

3）对数似然函数

为便于计算与优化，常使用**对数似然函数**：

$$\ell(\theta; x) = \log L(\theta; x)$$

- **优点**：
  - 将连乘转换为求和，避免数值下溢；
  - 求导更简便，常用于优化算法（如梯度下降）。

2.5.3 直观理解

似然函数可视为“概率函数的反向运用”：

- **概率问题**：已知参数 θ，预测观测数据 x 的出现概率；
- **似然问题**：已知数据 x，评估不同参数 θ 的相对合理性。

这种“由果推因”的思维是**最大似然估计（MLE）** 的核心。

2.5.4 举例说明

例2.12： 伯努利试验

假设投掷一枚硬币10次，出现7次正面、3次反面。若正面概率为 θ，则似然函数为：

$$L(\theta; x) = \theta^7 (1-\theta)^3$$

通过最大化该函数，可估计出 $\theta \approx 0.7$ 时最符合观测。

例2.13： 正态分布估计

设样本 $x_1, \ldots, x_n \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$，若方差 σ^2 已知，关于均值 μ 的似然函数为：

$$L(\mu; x) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

其对数似然为：

$$\ell(\mu; x) = -\frac{n}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2$$

最大化 $\ell(\mu; x)$ 等价于最小化平方误差，解为样本均值 $\hat{\mu} = \bar{x}$。

信息论基础

2.6 熵、互信息、KL散度

2.6.1 熵 $H(X)$

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

熵衡量随机变量 X 的不确定性或信息量。熵越大，表示 X 的分布越分散、不确定性越高；熵越小，说明 X 越确定。

2.6.2 条件熵 $H(Y|X)$

$$H(Y|X) = -\sum_{x,y} p(x,y)\log p(y|x)$$

条件熵衡量在已知 X 的情况下，Y 仍有多少不确定性。可以理解为“剩余的不确定性”。

2.6.3 互信息 $I(X;Y)$

1）定义

$$I(X;Y) = H(X) - H(X|Y)$$

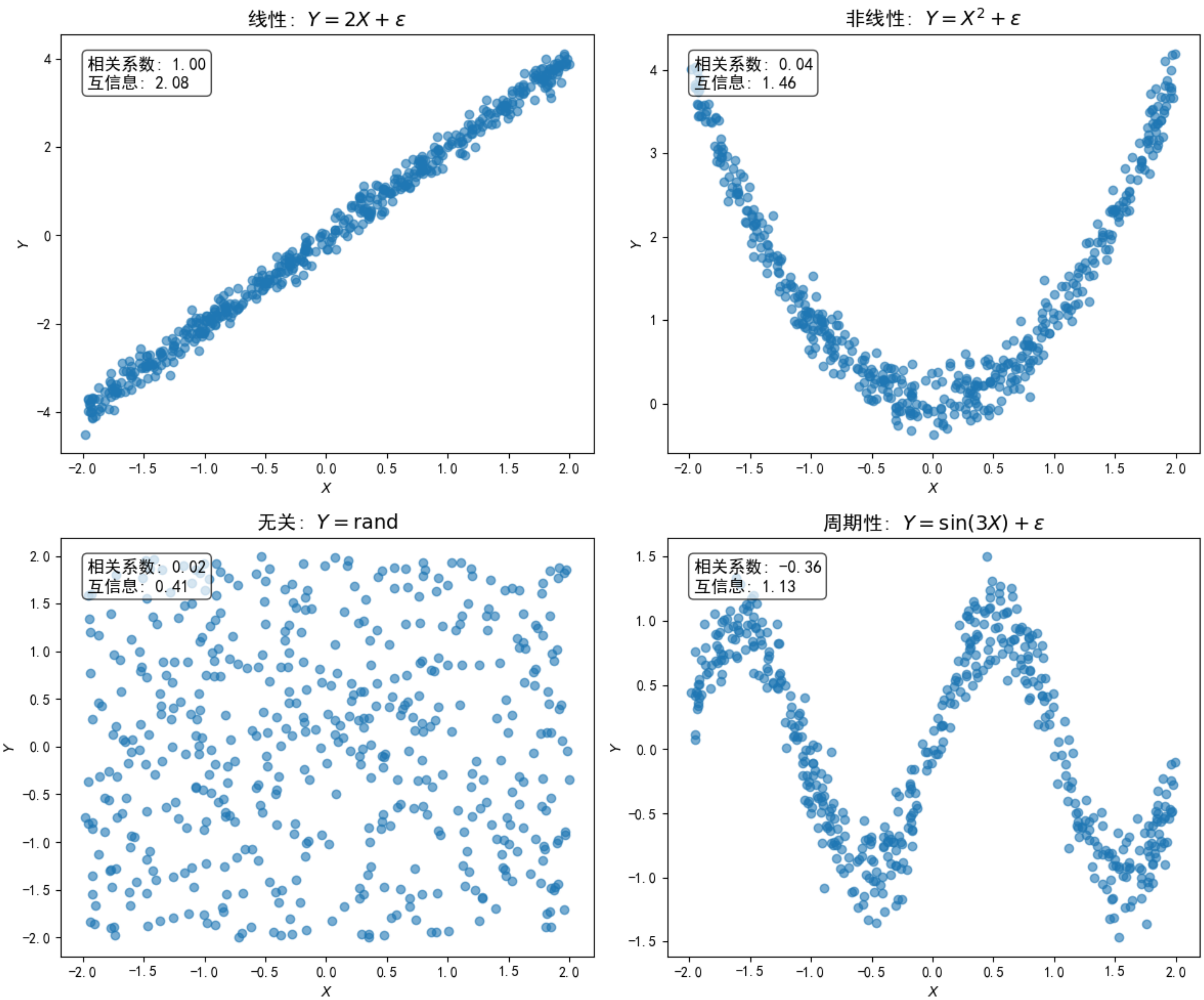
互信息衡量两个变量之间“共享”的信息量。它表示知道 Y 后，关于 X 的不确定性减少了多少。互信息为零，表示 X 与 Y 完全独立；互信息越大，说明两者关联越紧密。

2）互信息与相关系数的比较

- **互信息**是信息论中的概念，能够捕捉任意类型的统计依赖关系（不仅仅是线性关系），对变量之间的非线性、复杂关系也敏感。
- **相关系数**（如皮尔逊相关系数）只衡量变量之间的线性相关性。相关系数为零时，变量可能存在线性之外的其他依赖关系，但互信息仍可能大于零。
- 互信息总是非负，而相关系数可能为负（表示负相关）。
- 例如，对于两个变量 X 和 Y，如果 $Y = X^2$，则相关系数可能为零，但互信息却大于零，因为 Y 完全由 X 决定。

可视化展示

关系类型	相关系数	互信息
线性	高	高
非线性（如 $Y = X^2$）	低/0	高
无关	0	0
周期/复杂	低/0	高



2.6.4 KL散度（Kullback-Leibler Divergence）

1） 定义

给定两个定义在同一概率空间上的概率分布 P 与 Q，KL 散度定义为：

- **离散型变量**：

$$D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) = \sum_x p(x)\,\log \frac{p(x)}{q(x)}$$

- **连续型变量**（积分形式）：

$$D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) = \int p(x)\,\log \frac{p(x)}{q(x)}\,dx$$

这里的对数底数可选为 e（单位：**nats**）或 2（单位：**bits**）。

直观理解

KL 散度衡量***“用 Q 近似 P 时的信息损失”**。

- 如果数据真实分布是 P，但我们用模型分布 Q 进行编码或推断，KL 散度刻画了额外消耗的平均信息量。
- 它不是一个对称的距离度量，而是一个**方向性的信息差异度量**。

2）性质

（1）**非负性**（Gibbs 不等式）

$$D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) \geq 0$$

取等号当且仅当 $P = Q$（几乎处处），体现了KL散度的“最小性”——分布与自身的差异为零。

（2）**不对称性**

$$D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) \neq D_{\mathrm{KL}}(Q\|P)$$

交换顺序会得出不同结果，因此它不是严格意义的“距离”或“度量”。

（3）**为零的条件**

$$D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad P = Q$$

（存在零概率集合除外）

（4）**与交叉熵的关系**
交叉熵可写为：

$$H(P,Q) = H(P) + D_{\mathrm{KL}}(P\|Q)$$

其中 $H(P)$ 是熵。即：交叉熵等于真实分布的信息熵加上 KL 散度。

3）应用场景

- **统计假设检验**
  似然比检验中的**对数似然比统计量**，在大样本下和 KL 散度密切相关；本质上是检测 "真分布 P" 与 "假设分布 Q" 的差别。
- **机器学习与信息论**
  - **分布拟合**：最大似然估计等价于最小化经验分布对模型分布的 KL 散度。
  - **变分推断**：通过最小化近似后验与真实后验的 KL 散度，实现推断。
  - **损失函数**：许多算法的损失（如交叉熵损失）是 KL 散度的特例。
  - **生成模型训练**：GAN、VAE 等都会涉及 KL 散度或其变体（JS 散度）。

4）例题

例题2.12： KL 散度计算

已知：

$$P = (0.4,\, 0.6), \quad Q = (0.5,\, 0.5)$$

计算：

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}(P\|Q) &= 0.4\log\frac{0.4}{0.5} + 0.6\log\frac{0.6}{0.5} \\ &= 0.4\cdot\log 0.8 + 0.6\cdot\log 1.2 \\ &\approx -0.08924 + 0.10726 \\ &\approx 0.01802\ (\mathrm{nats}) \end{aligned}$$

解释：

- 结果正且接近于 0，说明两分布 P 与 Q 差异很小；
- 单位 “nats” 表示按自然对数计的信息量（若使用 $\log_2$，结果单位为 bits）。

> 小结：KL 散度度量的是“方向性信息差异”，其数值大小依赖于真实分布 P 与近似分布 Q 的差异，以及我们的方向选择。

矩阵与线性代数

2.7 矩阵的含义

2.7.1 从线性方程组引入

我们常见的线性方程组如下：

$$
\begin{aligned}
5x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 &= 7 \\
2x_1 + x_2 + 4x_3 - 2x_4 &= 1 \\
x_1 - 3x_2 - 6x_3 + 5x_4 &= 0
\end{aligned}
$$

可以将其写成矩阵与向量的乘积形式：

$$
\begin{bmatrix} 5 & -1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 4 & -2 \\ 1 & -3 & -6 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

记

$$
A = \begin{bmatrix} 5 & -1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 4 & -2 \\ 1 & -3 & -6 & 5 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 7 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

则有

$$
Ax = b
$$

2.7.2 向量内积的介绍

将矩阵与向量的乘积 Ax 展开来看，实际上就是矩阵 A 的每一行与向量 x 的内积。例如：

$$
Ax = \begin{bmatrix} a_1^T x \\ a_2^T x \\ a_3^T x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

其中，a_i^T 表示矩阵 A 的第 i 行向量。

向量内积 $a^T x$ 的几何意义为：

$$
a^T x = \|a\|_2 \|x\|_2 \cos\theta
$$

即为向量 x 在向量 a 方向上的投影长度，再乘以 a 的模长，并带有正负号（由夹角 θ 决定）。

2.7.3 矩阵的几何意义

因此，矩阵可以看作是对空间中向量的一种线性变换。矩阵的每一行对应一个方向，Ax 就是把向量 x 在这些方向上的投影长度组合起来，形成新的向量 b。更一般地说，$m \times n$ 的矩阵可以把 n 维空间中的向量映射到 m 维空间，实现空间的线性变换。

2.8 矩阵乘法

2.8.1 定义

设 A 是 $m \times k$ 阶矩阵，B 是 $k \times n$ 阶矩阵，矩阵乘法 $C = AB$ 定义为：C 是 $m \times n$ 阶矩阵，其中

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^{k} a_{il} b_{lj}$$

即 C 的第 i 行第 j 列的元素等于 A 的第 i 行与 B 的第 j 列对应元素乘积的和。

2.8.2 形式

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mk} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & b_{k2} & \cdots & b_{kn} \end{bmatrix}$$

$$C = AB = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m1} & c_{m2} & \cdots & c_{mn} \end{bmatrix}$$

其中

$$c_{ij} = a_{i1} b_{1j} + a_{i2} b_{2j} + \cdots + a_{ik} b_{kj}$$

2.8.3 几何意义

矩阵乘法体现了线性变换的复合：

- 矩阵 B 首先将向量进行一次线性变换，得到新的向量；
- 然后矩阵 A 再对变换后的向量进行第二次线性变换；
- 整体效果等同于先后作用于向量的两个线性变换的合成。

每个元素 c_{ij} 可以看作是 A 的第 i 行向量与 B 的第 j 列向量的内积。矩阵乘法不仅仅是元素相乘，更重要的是它描述了空间变换的过程。

2.9 矩阵的不变量

矩阵的不变量，是指在**更换坐标系**（基底变换）或进行**相似变换**时，依然保持不变的性质或数值。
它们不仅是线性代数中的代数核心，还往往对应**明确的几何特征**和**物理量**，揭示了线性变换的“本质行为”。

这些不变量，就像是变换的**DNA** —— 无论用什么坐标系描述，它们都不会改变。

2.9.1 相似矩阵

定义
若存在可逆矩阵 P，使得：

$$B = P^{-1}AP$$

则称 B 与 A **相似**，记作 $A \sim B$。

几何意义

- 相似矩阵是**同一个线性变换在不同基底下的表现形式**。
- 就像同一条直线，在不同坐标系下方程不同，但直线本身没变。

物理意义

- 在物理学中，相似变换对应于**更换参考系**或**重新定义基矢**，变换的本质（如能量、运动规律）保持不变。

2.9.2 特征值与特征向量

定义
对于方阵 A，若存在非零向量 $\mathbf{x}$ 和标量 λ 满足：

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

则 λ 为特征值（eigenvalue），$\mathbf{x}$ 为对应的特征向量（eigenvector）。

几何意义

- 特征向量是在变换下**方向保持不变**的向量。
- 特征值是沿该方向的**伸缩因子**：$\lambda>1$ 表示拉伸；$0<\lambda<1$ 表示压缩；负值表示方向翻转并缩放。

物理意义

- 振动与波动：特征值对应固有频率，特征向量对应振型（mode shape）。
- 量子力学：特征值是本征能量，特征向量是本征态。
- 图论：特征值可反映网络的连通性、复杂度等结构特征。

性质

- 不同特征值对应的特征向量线性无关。
- 相似矩阵有相同的特征值（不变量）。
- 若 A 可逆，A^{-1} 的特征值是 $1/\lambda$。

2.9.3 行列式（Determinant）

设单位立方体的边由标准基向量

$$\mathbf{e}_1 = (1, 0, \ldots, 0),\ \mathbf{e}_2 = (0, 1, \ldots, 0),\ \cdots,\ \mathbf{e}_n = (0, \ldots, 0, 1)$$

构成。

经过矩阵 A 作用，这些基向量分别变成：

$$\mathbf{u}_1 = A\mathbf{e}_1 = \text{第1列}$$

$$\mathbf{u}_2 = A\mathbf{e}_2 = \text{第2列}$$

$$\cdots \quad \mathbf{u}_n = \text{第n列}$$

所以，变换后的“立方体”实际上是由列向量 $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n$ 张成的**平行多面体**。

在向量几何中，**由向量 $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n$ 张成的平行多面体的体积**等于：

$$体积 = |\det(\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n)|$$

其中$\det(\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_n)$就是以这组向量作为列构成的矩阵的行列式。

几何意义

- $|A|$ 的绝对值表示变换对单位立方体的**体积缩放因子**。
- 符号表示是否翻转空间取向（右手系 ↔ 左手系）。

物理意义

- 行列式为零：变换会把某些方向压缩到低维，信息丢失 → 奇异矩阵，无唯一逆解。
- 在线性方程组中，行列式为零意味着无唯一解。

性质

- 交换两行（列） → 行列式变号。
- 某行（列）乘以 k → 行列式乘以 k。
- 一行（列）加另一行（列）的倍数 → 行列式不变。

2.9.4 特征多项式与迹（Trace）

定义
特征多项式：

$$f_A(\lambda) = |\lambda I - A| = \lambda^n - (\mathrm{tr}A)\lambda^{n-1} + \cdots + (-1)^n |A|$$

不变量关系

- **迹**：$\mathrm{tr}(A) = \sum_{i=1}^n \lambda_i$，等于特征值之和。
- **行列式**：$|A| = \prod_{i=1}^n \lambda_i$，等于特征值的乘积。

几何意义

- 迹：总的“尺度变化率”或拉伸总和。
- 行列式：整体体积缩放因子。
- 特征多项式的根（λ）直接揭示压缩/拉伸比例。

物理意义

- 迹在物理中常与守恒量、总能量相关。
- 行列式与系统的可逆性、能量流守恒有关。

2.9.5 奇异值分解（SVD）

定理
任意矩阵 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 可写作：

$$A = U\Sigma V^H$$

其中：

- U, V：酉（正交）矩阵 → 旋转/反射变换；
- Σ：对角矩阵，主对角线上的非负实数为奇异值（singular values）。

几何意义

1. V^H：旋转输入坐标，使其与主方向对齐；
2. Σ：在这些主方向上进行拉伸/压缩；
3. U：旋转输出坐标到目标方向。

物理意义

- 奇异值反映变换在各主方向上的强度（最大/最小伸缩因子）。
- SVD揭示矩阵的有效秩，可用于降噪、压缩信息。
- 在信号处理、PCA（主成分分析）、模式识别中，SVD提供最佳低秩近似的数学基础（Eckart–Young 定理）。

Eckart–Young定理：

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 的 SVD 为：

$$A = U\Sigma V^T, \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$$

对给定的正整数 $k < r$，令：

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T$$

即只保留前 k 个最大的奇异值及对应的奇异向量。

则有：

$$\min_{\text{rank}(B)\le k} \|A-B\|_F = \|A-A_k\|_F = \sqrt{\sum_{i=k+1}^{r} \sigma_i^2}$$

以及：

$$\min_{\text{rank}(B)\le k} \|A-B\|_2 = \|A-A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$$

其中：

- $\|\cdot\|_F$ 是 Frobenius 范数（平方和的平方根）。
- $\|\cdot\|_2$ 是谱范数（最大奇异值）。
- $\mathbf{u}_i, \mathbf{v}_i$ 分别是 U, V 的第 i 列。

🌟 全景总结：矩阵不变量一览表

不变量	保持不变的变换	几何意义	物理意义
特征值集合	相似变换	方向伸缩因子	固有频率 / 能级
特征向量子空间	相似变换	方向不变直线	模态形态 / 本征态
行列式	相似变换	体积缩放因子及方向翻转	可逆性 / 空间压缩
迹	相似变换	总伸缩率	总能量、守恒量
奇异值	正交等距变换	主方向伸缩强度	信号能量主分布

2.10 矩阵函数与导数

2.10.1 矩阵函数

矩阵函数泛指自变量是矩阵（或向量）、值域可以是标量、向量或矩阵的函数。例如：

- 二次型：$f(x) = x^T A x$
- 迹函数：$f(X) = \text{tr}(A^T X)$
- 矩阵乘积：$f(X) = AXB$
- 矩阵范数：$\|X\|_F^2 = \text{tr}(X^T X)$

本节重点介绍这些函数的矩阵导数公式。

2.10.2 矩阵导数

为了方便记忆，本节默认以下约定：

- x：$n \times 1$ 列向量
- y：$m \times 1$ 列向量
- A, B, C：常数矩阵（不依赖自变量）
- α：标量（实数函数结果）
- 所有函数对自变量连续可微
- 采用常见的**分子布局（numerator-layout）**记号，即 $\frac{\partial f}{\partial x} = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}\right]^T$

1）向量关于向量的导数

线性函数：

$$y = Ax, \quad \frac{\partial y}{\partial x} = A$$

其中 $\frac{\partial y}{\partial x}$ 为 $m \times n$ 矩阵（雅可比矩阵）。

加常数：

$$y = Ax + b, \quad \frac{\partial y}{\partial x} = A$$

常数项 b 的导数为零。

2）标量关于向量的导数

线性型：

$$\alpha = a^T x, \quad \frac{\partial \alpha}{\partial x} = a$$

其中 a 为常数向量。

双线性型：

$$\alpha = y^T A x, \quad \frac{\partial \alpha}{\partial x} = A^T y, \quad \frac{\partial \alpha}{\partial y} = A x$$

这一式在统计与优化中非常常用。

二次型（对称矩阵）：

- 若 $A = A^T$，

$$\alpha = x^T A x, \quad \frac{\partial \alpha}{\partial x} = 2 A x$$

- 若 A 不一定对称，

$$\frac{\partial (x^T A x)}{\partial x} = (A + A^T) x$$

平方范数：

$$\alpha = \|x\|_2^2 = x^T x, \quad \frac{\partial \alpha}{\partial x} = 2x$$

3）标量关于矩阵的导数

迹形式的线性函数：

$$\alpha = \mathrm{tr}(A^T X), \quad \frac{\partial \alpha}{\partial X} = A$$

迹与矩阵乘积：

$$\alpha = \mathrm{tr}(X^T A X B), \quad \frac{\partial \alpha}{\partial X} = A X (B + B^T)/2 \quad \text{（若对称可简化）}$$

更一般地，

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(X^T A X B)}{\partial X} = A X B^T + A^T X B$$

Frobenius 范数平方：

$$\alpha = \|X\|_F^2 = \mathrm{tr}(X^T X), \quad \frac{\partial \alpha}{\partial X} = 2X$$

4）常用复合导数规则

- **链式法则（向量）**：
  若 $z = f(y)$，$y = g(x)$，则

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial x}^T \frac{\partial z}{\partial y}$$

  注意矩阵维度顺序，确保相乘得出正确形状。
- **链式法则（矩阵）**：
  如 $\alpha = \mathrm{tr}(A^T X), X = g(\theta)$，
  $\frac{\partial \alpha}{\partial \theta} = \mathrm{tr}\left(\left(\frac{\partial \alpha}{\partial X}\right)^T \frac{\partial X}{\partial \theta}\right)$

2.10.3 常用导数对照表

函数形式	导数结果	备注
$y = Ax$	$\frac{\partial y}{\partial x} = A$	y 向量，A 常矩阵
$a^T x$	a	标量对向量
$y^T Ax$	$\frac{\partial}{\partial x} = A^T y$	双线性型
$x^T Ax$	$(A + A^T)x$	对称时为 $2Ax$
$\mathrm{tr}(A^T X)$	A	线性迹函数
$\mathrm{tr}(X^T AX)$	$AX + A^T X$	对称 A 时为 $2AX$
$\|x\|_2^2$	$2x$	二范数平方
$\|X\|_F^2$	$2X$	Frobenius 范数平方

综合题

例题2.13

某传感器测量系统中，真实信号 S 与噪声 N 独立，且：

$$S \sim \mathcal{N}(\theta, \sigma_S^2), \quad N \sim \mathcal{N}(0, \sigma_N^2)$$

传感器输出为：

$$Y = S + N$$

现有两类任务：

1. **估计任务**：已知 σ_S^2, σ_N^2，在给定观测 $Y = y$ 的情况下，求最小均方误差（MMSE）估计 $\hat{S}(y)$。
2. **参数估计任务**：假设σ_S^2, σ_N^2 已知，但均值 θ 未知，且有独立观测样本 $y_1, \ldots, y_n$，求 θ 的最大似然估计（MLE）。
3. **协方差矩阵分析**：构造二维随机向量 $\mathbf{X} = \begin{bmatrix} S \\ Y \end{bmatrix}$，写出其协方差矩阵，并验证其半正定性。

解答

1) MMSE 估计

我们已知：

$$S \sim \mathcal{N}(\theta, \sigma_S^2), \quad N \sim \mathcal{N}(0, \sigma_N^2), \quad Y = S + N$$

由于 S 与 N 独立且均为高斯分布，(S, Y) 联合分布是二维高斯。

- 均值向量：

$$E[S] = \theta, \quad E[Y] = E[S] + E[N] = \theta$$

- 协方差：

$$\mathrm{Var}(S) = \sigma_S^2$$

$$\mathrm{Var}(Y) = \mathrm{Var}(S) + \mathrm{Var}(N) = \sigma_S^2 + \sigma_N^2$$

$$\mathrm{Cov}(S, Y) = \mathrm{Cov}(S, S + N) = \mathrm{Var}(S) + \underbrace{\mathrm{Cov}(S, N)}_{=0} = \sigma_S^2$$

二维高斯条件期望公式：

$$E[S|Y=y]=E[S]+\frac{\mathrm{Cov}(S,Y)}{\mathrm{Var}(Y)}(y-E[Y])$$

代入：

$$\hat{S}(y)=\theta+\frac{\sigma_S^2}{\sigma_S^2+\sigma_N^2}(y-\theta)$$

解释：这是一个**线性滤波器**，权重 $\frac{\sigma_S^2}{\sigma_S^2+\sigma_N^2}$ 决定了观测值 y 与先验均值 θ 的融合程度。

2) 最大似然估计（MLE）

已知：

$$Y\sim\mathcal{N}(\theta,\sigma_Y^2),\quad \sigma_Y^2=\sigma_S^2+\sigma_N^2$$

样本 $y_1,\ldots,y_n$ 独立同分布，其似然函数：

$$L(\theta)=\prod_{i=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_Y^2}}\exp\left(-\frac{(y_i-\theta)^2}{2\sigma_Y^2}\right)$$

对数似然：

$$\ell(\theta)=-\frac{n}{2}\log(2\pi\sigma_Y^2)-\frac{1}{2\sigma_Y^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\theta)^2$$

对 θ 求导并令其为零：

$$\frac{\partial\ell}{\partial\theta}=-\frac{1}{\sigma_Y^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\theta)=0$$

得：

$$\hat{\theta}_{\mathrm{MLE}}=\bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i$$

解释：在高斯模型下，均值的 MLE 就是样本均值。

3) 协方差矩阵

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} S \\ Y \end{bmatrix}$$

均值向量:

$$E[\mathbf{X}] = \begin{bmatrix} \theta \\ \theta \end{bmatrix}$$

协方差矩阵:

$$\Sigma_{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \operatorname{Var}(S) & \operatorname{Cov}(S,Y) \\ \operatorname{Cov}(Y,S) & \operatorname{Var}(Y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_S^2 & \sigma_S^2 \\ \sigma_S^2 & \sigma_S^2 + \sigma_N^2 \end{bmatrix}$$

验证半正定性:
对任意向量 $\mathbf{a} = [a_1, a_2]^T$:

$$\mathbf{a}^T \Sigma_{\mathbf{X}} \mathbf{a} = \sigma_S^2 (a_1 + a_2)^2 + \sigma_N^2 a_2^2 \geq 0$$

因为平方项系数非负,故 $\Sigma_{\mathbf{X}}$ 半正定。

总结

1. **MMSE估计**:

$$\boxed{\hat{S}(y) = \theta + \frac{\sigma_S^2}{\sigma_S^2 + \sigma_N^2}(y - \theta)}$$

2. **MLE估计**:

$$\boxed{\hat{\theta}_{\text{MLE}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i}$$

3. **协方差矩阵**:

$$\boxed{\Sigma_{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \sigma_S^2 & \sigma_S^2 \\ \sigma_S^2 & \sigma_S^2 + \sigma_N^2 \end{bmatrix}}$$

且它是半正定矩阵。

例题2.14

设 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为对称可逆矩阵，$b \in \mathbb{R}^n$ 为常向量，定义函数

$$f(x) = \|Ax - b\|_2^2 + \lambda\, x^T A^{-1} x$$

其中 $\lambda > 0$ 为常数。

请完成以下问题：

1. 将 $f(x)$ 化为二次型与常数项的形式：

$$f(x) = x^T M x - 2c^T x + \mathrm{const}$$

   并写出矩阵 M 和向量 c。
2. 计算 $\nabla_x f(x)$ 和 Hessian 矩阵 $\nabla_x^2 f(x)$。
3. 求使 $f(x)$ 最小的 $x^\star$ 的显式表达式，并说明该解与矩阵不变量（如正定性）的关系。
4. 解释这个优化问题的几何意义。

解答

1）化为二次型

首先展开：

$$\|Ax - b\|_2^2 = (Ax - b)^T (Ax - b) = x^T A^T A x - 2b^T A x + b^T b$$

因 A 对称，$A^T = A$。
再加上正则项：

$$\lambda\, x^T A^{-1} x$$

于是

$$f(x) = x^T (A^2 + \lambda A^{-1}) x - 2b^T A x + b^T b$$

与题中给的形式对比：

$$M = A^2 + \lambda A^{-1}, \quad c = Ab, \quad \text{const} = b^T b$$

2）梯度与 Hessian

梯度：

$$\nabla_x f(x) = 2Mx - 2c$$

（因为 M 对称，二次型导数公式：$\frac{\partial}{\partial x}(x^T M x) = 2Mx$）

Hessian：

$$\nabla_x^2 f(x) = 2M = 2(A^2 + \lambda A^{-1})$$

3）最优解 $x^\star$

由 $\nabla_x f(x) = 0$ 得：

$$2Mx - 2c = 0 \quad \Rightarrow \quad Mx = c$$

即：

$$(A^2 + \lambda A^{-1})x = Ab$$

由于 A 可逆，可两边同乘 A^{-1}：

$$(A + \lambda A^{-2})x = b$$

解为：

$$x^\star = (A + \lambda A^{-2})^{-1} b$$

这也可直接写成：

$$x^\star = (A^2 + \lambda A^{-1})^{-1} Ab$$

与矩阵不变量的关系：

- 若 A 是对称正定矩阵，则：
  i. A^{-1} 仍对称正定；
  ii. A^2 对称正定；
  iii. $A^2 + \lambda A^{-1}$ 对称正定（正定矩阵的和仍正定）。
- 这保证了 Hessian 正定，从而 $f(x)$ 是严格凸函数，最优解唯一。

4）几何意义

- 项 $||Ax - b||_2^2$：先将 x 经过线性变换 A，再与 b 对比误差平方。
- 项 $\lambda x^T A^{-1} x$：是基于 A^{-1} 定义的“加权范数”正则化项，惩罚过大的 x。
- 总体来看，这是在加权欧式距离意义下拟合 $Ax \approx b$ 的最优解，权重矩阵与 A 的不变量（对称性、特征值）相关。
- 特征值角度：如果 $A = Q\Lambda Q^T$（特征分解），则问题在各特征向量方向上等价于**独立的标量二次优化**，每个方向的伸缩由对应特征值 λ_i 控制。

总结

1.

$$M = A^2 + \lambda A^{-1}, \quad c = Ab, \quad \text{const} = b^T b$$

2.

$$\nabla_x f(x) = 2Mx - 2c, \quad \nabla_x^2 f(x) = 2M$$

3.

$$x^\star = (A^2 + \lambda A^{-1})^{-1} Ab$$

唯一性由 A 的正定性保证。
4. **几何解释**：是在由 A 定义的加权空间里，寻找最接近 b 的线性变换逆解，同时加入 A^{-1} 加权的正则化抑制。