

# 需要熟练掌握的人工智能算法基础

Hailiang Zhao @ ZJU.CS.CCNT

<http://hliangzhao.me>

May 16, 2020

## 一 概率论、数理统计与信息论

- 1 对于离散型随机变量，我们关心概率分布；对于连续型随机变量，没法枚举随机变量每个取值发生的概率，从而诞生了概率密度函数 (pdf)。
- 2 掌握：已知随机变量 $X$ 的 pdf 且 $Y = f(X)$ ，求解随机变量 $Y$ 的 pdf。
- 3 正确理解贝叶斯公式：

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

$P(A)$ 是原本 $A$ 发生的概率（先验）， $\frac{P(B|A)}{P(B)}$ 是新信息带来的调整（ $P(B|A)$ 是似然， $P(B)$ 是标准化项，让 $P(A|B)$ 仍在 0 到 1 之间）， $P(A|B)$ 是调整后 $A$ 发生的概率（后验）。

- 4 推导泊松分布和指数分布的 pdf：

- (1) 泊松分布：将一个时间段切分成等大小的时间片，每个时间片内事件只有“发生”和“不发生”两种情形（伯努利分布），泊松分布的随机变量就是该二项分布在时间片个数趋于无穷时事件发生的个数；
- (2) 指数分布：若某事件在给定时间段内发生的次数服从泊松分布，那么指数分布的随机变量就是该事件前后两次发生的时间间隔。

- 5 指数分布（连续）和几何分布（离散）具有无记忆性：

$$P(X = b | X > a) = P(X = b - a)$$

事件发生的概率并不会伴随着等待的时间变长而增加，事件第 $n+1$ 次发生与第1次发生概率一样，不会因为已经发生了 $n$ 次而改变。这一结论与人类的本能“赌徒心理”正好相反。

- 6 使用贝叶斯定理求解问题的关键：正确地识别问题中的随机事件（谁充当观测数据、谁充当随机变量）。
- 7 理解多元概率分布：

- (1) 理解排列数和组合数：

$$n \text{ 个不同元素的排列数: } P_n^k = n \cdot (n-1) \cdot \dots \cdot (n-k+1) = \frac{n!}{(n-k)!};$$

$$n \text{ 个不同元素的组合数: 在排列数的基础上除去同一个数字出现的排列数: } C_n^k = \frac{n!}{k! \cdot (n-k)!}.$$

- (2) 多元概率分布就是随机变量变成了随机向量。下面谈一谈典型的多元概率分布：多项分布和多元正态分布。

多项分布：设一个袋子中很多球，一共有 $K$ 种颜色。从袋子中有放回地取出 $n$ 个球，令 $X = (X_1, \dots, X_K)$ ，其中 $X_k$ 表示颜色为 $k$ 的球的个数，那么 $X$ 服从多项分布：

$$P((X_1, \dots, X_K) = (x_1, \dots, x_K) | \mu_1, \dots, \mu_K) = \frac{n!}{x_1! \dots x_K!} \mu_1^{x_1} \dots \mu_K^{x_K}$$

其中 $\mu_k$ 为每次抽取的球的颜色为 $k$ 的概率，且 $\sum_{k=1}^K x_k = n$ 。  $\frac{n!}{x_1! \dots x_K!}$ 是因为要从 $n$ 个球的排

列数中去除同一个颜色的球的排列数。

Gamma 函数被定义为  $\Gamma(z) = \int_0^\infty \frac{t^{z-1}}{\exp(t)} dt$ ，是阶乘扩展到实数域的版本。将  $\frac{n!}{x_1! \dots x_K!}$  替换为 Gamma 函数则有

$$P((X_1, \dots, X_K) = (x_1, \dots, x_K) | \mu_1, \dots, \mu_K) = \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K (x_k + 1))}{\sum_{k=1}^K \Gamma(x_k + 1)} \mu_1^{x_1} \dots \mu_K^{x_K}$$

多元正态分布：

$$P((X_1, \dots, X_K) = (x_1, \dots, x_K) | \mu, \Sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{K}{2}} |\Sigma|^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} (x - \mu)^\top \Sigma^{-1} (x - \mu)\right)$$

其中  $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_K)$  为各个随机变量的均值， $\Sigma$  为协方差矩阵。 $\Sigma$  作为对称阵是一定可以正交对角化的，故  $\Sigma^{-1}$  必然存在。若  $\Sigma = \sigma^2 I$ （各维随机变量相互独立且方差相同），则是各向同性多元正态分布。

## 8 理解最大似然估计（MLE）和贝叶斯推断：

- (1) 将某一事件发生的概率称为这个事件的参数，通过证据（已经发生了的观测数据），对该参数进行推断的过程就是似然，通过“最大化证据发生的概率”找到最有可能的参数，就是最大似然估计。

- (2) 为什么“最大化证据发生的概率”是合理的？这是因为我们朴素地认为：

一个合理的参数应该尽可能地让真实发生的事件（观测数据）的概率最大。

- (3) 参数本身也可以看成是一个随机变量，它也具备自己的 pdf。在没有证据之前，假设参数服从某一个分布，我们将这个分布称为该参数的先验分布。经过观测数据的修正得到的新的分布，称之为该参数的后验分布。贝叶斯推断就是“先验分布 + 观测数据  $\rightarrow$  后验分布”这个过程。人们为了简化贝叶斯推断过程，喜欢让参数的先验分布和后验分布是同一个分布（这个分布当然是手工构造出来的），该分布的系数经过观测数据的洗礼得到了修正。满足这样条件的先验分布和后验分布被称为共轭分布。例如，第 7 条提到的多项分布，其参数的共轭分布是 Dirichlet

分布： $P(u_1, \dots, u_K | \alpha) = \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^K \alpha_k)}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_K)} \mu_1^{\alpha_1} \dots \mu_K^{\alpha_K}$ 。为什么参数的共轭分布和原始随机变量（向量）

的分布如此相似？这是因为参数的共轭分布的参数  $\alpha$  就是原分布的随机变量（向量）。

- (4) 观测数据越多（证据越多），参数的分布就越集中，修正的效果就越好。以抛硬币为例，我们很自然地会假设正面落下的概率为  $\frac{1}{2}$ ，这就是先验。我们之所以会瞬间想到这个先验是因为我们作为现代人接受了各式基础教育。这个先验在几万年前的原始人脑海里是绝不存在的。有了这个先验，我们不断地抛硬币获取观测数据，根据这些观测数据来修正先验。如果硬币没有造假，那么在观测数据量极为庞大的情况下，后验无限逼近  $\frac{1}{2}$ 。如果硬币造假了，正面落下的次

数远多于反面，那么后验就会被修正到一个远小于  $\frac{1}{2}$  的位置。以上这个例子中，参数的分布是连续分布（Beta 分布）。如果举的例子中参数的分布是离散分布（比如分类问题）可能会更好理解。在观测数据足够多的情况下，再差的先验都可以被很好地修正，先验的存在感微乎其微。传统的统计学习算法强烈依赖于假设空间（先验）的选取，正是因为观测样本无法给出足够合理的修正，因而它们又被称为“小样本学习”。

## 9 对于给定的随机变量，和期望值相差给定距离的事件发生的概率是多少？（掌握推导）

- (1) 马尔科夫不等式：

$$P(X \geq a) \leq \frac{E(X)}{a}, X \geq 0, a \geq 0$$

(2) 切比雪夫不等式:

$$P(|X - \mu| \geq k\sigma) \leq \frac{1}{k^2}, k > 0, \mu = E(X), \sigma = \sqrt{Var(X)}$$

10 样本方差的计算公式为  $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$ , 为什么分母是  $n-1$ ?

(1) 中心极限定理: 从均值为  $\mu$ , 方差为  $\sigma^2$  的任意一个总体中抽取样本量为  $n$  的样本, 当  $n$  充分大的时候, 样本均值  $\bar{X}$  的抽样分布近似服从均值为  $\mu$ , 方差为  $\frac{\sigma^2}{n}$  的正态分布。

(2) 问题 1: 已知随机变量  $X$  的期望为  $\mu$ , 则方差定义为  $\sigma^2 = E[(X - \mu)^2]$ 。当方差  $\sigma^2$  未知时, 为什么可以用  $S^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2$  近似  $\sigma^2$ ?

思路: 证明  $E(S^2) = \sigma^2$ 。借助中心极限定理, 该式表明随机变量  $S^2$  服从均值为  $\sigma^2$  的正态分布, 因此选择  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2$  来近似  $\sigma^2$  是合理的。

(3) 问题 2: 当期望  $\mu$  也未知时, 用均值  $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$  来近似  $\mu$ , 为什么  $S^2$  的计算公式变成了

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$$

i.e. 分母变成了  $n-1$ ?

思路: 作差  $\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2 - \sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2$ , 可发现二者 (期望上) 相差  $\frac{1}{n} \sigma^2$ 。

11 理解协方差与相关系数的定义由来:

(1) 如何描述两个随机变量  $X$  和  $Y$  之间的相关性? **观察围起来的矩形面积差的符号!**

设随机变量  $X$  和  $Y$  的  $n$  个样本为  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ , 则面积差之和为  $A = \sum_{i \leq j} (x_i - y_i)(x_j - y_j)$ , 一共有  $C_n^2$  个面积差。若  $A < 0$  则负相关, 这表明二者的增长方向是相反的。同理可判断  $A = 0$  则不相关,  $A > 0$  则正相关。

(2) 计算面积和太麻烦! **直接使用期望**——

$$A' = \sum_{i=1}^n (x_i - \mu_X)(x_i - \mu_Y)$$

但是每个样本点发生的概率不一样, 最好赋予不同的权重, 所以还要修改。干脆直接**定义在期望上**好了:

$$Cov(X, Y) = E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)]$$

这就是随机变量  $X$  和  $Y$  的协方差。对  $Cov$  的符号判断和对  $A$  的一致。当样本个数给定时 (例如  $n$  个), 则  $\Sigma_{n \times n}$  是协方差矩阵, 且  $\Sigma_{n \times n}(X_i, Y_j) = (X_i - \mu_X)(Y_j - \mu_Y)$ 。

(3) 和方差一样, 协方差有单位, 且无法比较  $X$  和  $Y$  哪一个和  $Z$  更相关。因此引入相关系数**去掉量纲**:

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

这就是随机变量  $X$  和  $Y$  的协方差系数。

12 点估计与区间估计 (以正态分布为例, 假设随机变量  $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ )

- (1) 点估计：做一次抽样 $X_1, \dots, X_n$ ，取样本均值 $\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 就是我们对期望的一次点估计；
- (2) 区间估计：点估计最大的问题在于我们没法判断哪一次估计 $\hat{\mu}_1, \dots, \hat{\mu}_m$ 更好。把点替换为区间会怎样？尝试分析分析呗——

设随机变量 $M = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 表示每次大小为 $n$ 的抽样的均值，则根据中心极限定理可知

$M \sim N(\mu, \frac{\sigma^2}{n})$ 。可以算出，以 $\mu$ 为中心，面积占比 95% 的区间为 $P(\mu - 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \leq M \leq \mu + 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}})$ 。

也就是说，对于一次采样均值 $\hat{\mu}$ ，如果我们以 $1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{n}}$ 为半径作区间，就有 95% 的概率包含 $\mu$ 。我

们称 95% 为置信水平。显然，构造区间估计需要随机变量的方差已知。

### 13 理解假设检验：

以抛硬币为例，假设硬币上没有作假，“抛几次，现实世界碰一碰？”就是检验该假设。定义随机变量 $X =$ “抛 $n$ 次，其中正面落下的次数”。例如 $n = 10$ ，正面落下 9 次，则 P 值 $P(X \geq 9) \approx 0.01$ （亦可检测双侧 P 值 $P(X \geq 9 \wedge X \leq 1)$ ）。如将显著水平定为 0.05，则 $P(X \geq 9) < 0.05$ ，说明这个硬币很明显造假了（i.e. 假设显著不成立）。

### 14 为什么用算术平均值作为测量/观测的结果是合理的？

- (1) 这个问题触及了现代概率论的核心。它和以下几个问题等价：

“最小二乘法的理论依据是什么？”

“为什么测量误差符合正态分布？”

“如何推导正态分布的 pdf？”

- (2) 让我们层层递进。

对于真值 $y^*$ ，我们将对其的估计记为 $y$ 。假设测量了 $n$ 次，每次观测结果记为 $y_1, \dots, y_n$ ，则总的误差平方为

$$\epsilon = \sum_{i=1}^n (y - y_i)^2$$

如果误差是随机的，那么就应该围绕着真值上下波动，有正有负（假设我们的观测是无偏的）。

[这其实就是大数定理——服从独立同分布的样本均值收敛于期望值]那么能够让 $\epsilon$ 取值最小的 $y$ 就应该是最

接近 $y^*$ 的值。求解该最优化问题（令 $\frac{d\epsilon}{dy} = 0$ 即可），可以得到

$$y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$

这就是观测的算术平均值。这个求解思路正是最小二乘法（MSE 最小化）。用最小二乘法做多项式拟合只需要把上述 $y$ 替换成 $f(x) = \sum_{i=1}^{n+1} a_i x^{n+1-i}$ 并依次对 $a_i$ 求偏导即可。

- (3) 如果最小二乘法是对的，那么用算术平均值作为测量/观测的结果就是合理的。可是，为什么最小二乘法就对呢？

我们可以用 MLE 来尝试回答这一问题。设每次一观测值 $x_i$ 和真值 $x$ 之间存在一个误差 $\epsilon$ ，假设

误差服从概率分布 $p(\epsilon)$ ，则 $n$ 次观测会得到一个联合概率分布，记为

$$L(x) = p(x - x_1) \cdot p(x - x_2) \cdot \dots \cdot p(x - x_n)$$

根据 MLE,  $x = \operatorname{argmax}_x L(x) \leftrightarrow \frac{dL(x)}{dx} = 0$ , 又因为最小二乘法认为  $x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ , 联立

$$\begin{cases} \frac{dL(x)}{dx} = 0 \\ x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \end{cases}$$

解得  $p(\epsilon) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)\sigma}} \exp(-\frac{\epsilon^2}{2\sigma^2})$  (这个结果是高斯最先发现的。这个过程很有趣, 仅需要高中数学知识, 用到的技巧很有全国高中数学联赛那味儿, 务必自己推导)。这意味着测量误差符合正态分布! (其实那个时候人们还不知道这个 pdf 对后世有着怎样巨大的影响。后来人们直接把 Gaussian 作为 Normal Distribution 的同义词, 用于纪念高斯大神的巨大贡献。我这里的因果顺序和历史上知识发现的顺序是反的)

- (4) 如果测量误差符合正态分布是可接受的, 那么最小二乘法就是可接受的。可是, 为什么测量误差符合正态分布呢?? (套娃中)

后来, 拉普拉斯发现, 若误差可视为微小量的叠加, 则误差服从正态分布。这就是现代概率论历史上最重要的结论——中心极限定理的前身。(套娃结束)

- (5) 中心极限定理的雏形是人们为了求解“二项分布中距离期望一定距离的事件发生的概率近似为多少”这一问题而发现的。后来又被推广到任意分布。而观测误差和最小二乘法的相关研究是从天文学引出的问题。后世的统计学三大分布无不依赖于正态分布而构造。

## 15 理解熵及相关的概念:

- (1) 熵被拿来衡量一个随机事件的不确定性。

接下来的内容将针对离散随机变量展开描述。

对一个随机变量进行编码, **自信息  $I(x)$  是  $X=x$  的信息量/编码长度** (选择对数函数只是为了描述“事件发生的概率越大, 则编码越容易、所包含的信息量越少”这一现象。你当然可以选择别的, 只要大家认同即可):

$$I(x) = -\log(P(X=x)) = -\log P(x)$$

而**熵则是平均编码长度 (也是最优编码长度)**:

$$H(X) = E[I(X=x)] = -\sum_x P(x) \log P(x)$$

一个确定的事件, 对其编码熵为零; 一个不确定的事件 (即随机事件), 不确定的程度越大熵就越大。显然, 均匀分布的熵最大。

- (2) 由此可定义联合熵和条件熵:

$$\text{联合熵: } H(X, Y) = -\sum_x \sum_y P(x, y) \log P(x, y)$$

$$\text{条件熵: } H(X|Y) = -\sum_x \sum_y P(x, y) \log P(x|y)$$

- (3) 互信息描述了当一个随机变量已知时, 另一个随机变量的不确定性减少了多少:

$$I(X; Y) = I(Y; X) = \sum_x \sum_y P(x, y) \log \left( \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)} \right)$$

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

- (4) 交叉熵与 KL 散度: 对于分布为  $p$  的随机变量,  $H(p) = H(X)$  是其最优编码长度, 而交叉熵则

是“按照概率分布为 $q$ 的最优编码对真实分布为 $p$ 的信息进行编码”的长度：

$$H(p, q) = E_p[-\log(q(x))] = -\sum_x P(x) \log(q(x))$$

相应地，概率分布 $q$ 来近似 $p$ 进行编码所造成的信息损失量就是 KL 散度：

$$D_{KL}(p||q) = H(p, q) - H(p) = -\sum_x P(x) \log\left(\frac{p(x)}{q(x)}\right) \geq 0$$

## 二 微积分、复数与优化

### 1 理解微积分的本质：

(1) 微分是对差分的近似，以直代曲。因此微分又被称为“线性近似”。

(2) 微分的严格定义（需时常温习 $\epsilon - \delta$ 语言）：

设函数 $y = f(x)$ 在某区间内有定义， $x_0$ 及 $x_0 + \Delta x$ 在此区间内，若函数增量 $\Delta y = f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)$ 可表示为 $\Delta y = A \cdot \Delta x + o(\Delta x)$ ，其中 $A$ 是不依赖于 $\Delta x$ 的常数，则函数 $y = f(x)$ 在 $x_0$ 处可微。 $A \cdot \Delta x$ 是 $f(x)$ 在 $x_0$ 处相对于自变量增量 $\Delta x$ 的微分，记作 $dy$ 。

(3) 积分 =  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum$  微分。

### 2 理解切线和导数的本质：切线是割线组成的数列的极限，导数是割线斜率的极限。

### 3 掌握三大微分中值定理（注意条件：闭区间上连续，开区间上可导）。

### 4 区分插值与拟合：

(1) 插值：函数精确经过每一个数据点；

(2) 拟合：采用最小二乘法的策略，做 MSE 最小化。并不要求精确经过每一个点。

### 5 推导多项式插值与泰勒展开式：根据观测数据 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ ，确定 $f(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$ 的各个系数，保证 $f(x)$ 经过每一个观测数据。常规的计算方法就是带入表达式，求解线性方程组。弊端是每新增一个数据点全部系数 $a_i$ 都要重新算。

(1) 牛顿插值法：每新增一个观测数据，只需计算相关的部分“均差”即可，计算可以增量式进行，已经付出的算力没有浪费——

设 $f_1(x)$ 经过 $(x_0, f(x_0))$ 和 $(x_1, f(x_1))$ 并长成这个样子：

$$f_1(x) = f(x_0) + b_1(x - x_0)$$

带入 $(x_1, f(x_1))$ 解得 $b_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$ 。从而得到

$$f_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0)$$

设 $f_2(x)$ 经过 $(x_i, f(x_i))|_{i=0,1,2}$ 并长成这个样子：

$$f_2(x) = f_1(x) + b_2(x - x_0)(x - x_1)$$

带入 $(x_2, f(x_2))$ 解得 $b_2 = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}$ 。从而得到

$$f_2(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) + \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}(x - x_0)(x - x_1)$$

进一步得到 $f_3(x)$ ， $\dots$ ， $f_n(x)$ 。最后的 $f_n(x)$ 就是我们想要的 $f(x)$ 。

定义均差简化描述:

$$\text{一阶均差: } f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$$

$$\text{二阶均差: } f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}$$

...

从而得到

$$f(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + \cdots + f[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdot \dots \cdot (x - x_{n-1})$$

(2) 拉格朗日插值法: 用  $n+1$  个  $n$  次曲线的叠加得到  $f(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$ 。

定义  $f_i(x) = \prod_{j \neq i}^{0 \leq j \leq n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$ , 表示只经过数据点  $(x_i, 1)$  的  $n$  次曲线, 则

$$f(x) = \sum_{i=0}^n y_i f_i(x) = \sum_{i=0}^n y_i \prod_{j \neq i}^{0 \leq j \leq n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

(3) 两种插值方法得到的是同一根曲线吗?

因为这两种方法均是线性的, 所以可以从范德蒙德行列式入手分析解的唯一性是否成立。 $Ax = b$  有唯一解的条件是矩阵  $A$  非奇异, 即行列式不为零。代入本问题即可验证是同一根曲线:

$$|A| = \prod_{j \neq i}^{0 \leq i \leq j \leq n} (x_j - x_i), x_j \neq x_i \leftrightarrow |A| \neq 0$$

(4) 多项式插值的本质是利用多项式的强大解释性去逼近任意光滑函数。这一思想促使了泰勒展开式的诞生。

设  $f(x)$  在  $x_0, x_0 + \Delta x, \dots, x_0 + n\Delta x$  处的值已知。和牛顿插值相比, 这里的数据点是等间隔的。

定义一阶差分:

$$\Delta f(x_0) = f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)$$

...

$$\Delta f(x_0 + (n-1)\Delta x) = f(x_0 + n\Delta x) - f(x_0 + (n-1)\Delta x)$$

那么牛顿插值法中的  $f_1(x)$  变成了

$$f_1(x) = f(x_0) + \frac{\Delta f(x_0)}{\Delta x} (x - x_0)$$

定义二阶差分:

$$\Delta^2 f(x_0) = \Delta f(x_0 + \Delta x) - \Delta f(x_0)$$

...

$$\Delta^2 f(x_0 + (n-2)\Delta x) = \Delta f(x_0 + (n-1)\Delta x) - \Delta f(x_0 + (n-2)\Delta x)$$

那么牛顿插值法中的  $f_2(x)$  变成了

$$f_2(x) = f(x_0) + \frac{\Delta f(x_0)}{\Delta x} (x - x_0) + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2\Delta x^2} (x - x_0)(x - x_1)$$

可以验证, 最终将会得到

$$\begin{aligned} f(x) = f_n(x) = & f(x_0) + \frac{\Delta f(x_0)}{\Delta x} (x - x_0) + \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2\Delta x^2} (x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ & + \frac{\Delta^n f(x_0)}{2\Delta x^n} (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) \end{aligned}$$



当 $\Delta x \rightarrow 0$ 时 (此时 $x - x_0 = \dots = x - x_n$ ), 泰勒预测

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + o((x - x_0)^n)$$

这就是泰勒展开式。泰勒展开的本质是充分利用任意曲线上某一点上的“光滑信息”，用多项式插值这一段局部曲线。

- (5) 泰勒展开在计算机内部有许多应用。比如三角函数不方便计算，但是多项式就好算多了。用泰勒展开估计函数值的合理程度收到收敛圆半径(展开点 $x_0$ 到最近的奇点的距离)的影响。显然，

对于 $x^{\frac{1}{3}}$ ，在 $x_0 = 29$ 处展开远比在 $x_0 = 7$ 处展开精确的多。

“收敛圆的存在表明实数是复数的一部分，即使只研究实数问题，也会被复数影响到。”

## 6 理解连续和一致连续的概念：

(1) 连续： $\lim_{x \rightarrow c} (f(x) - f(c)) = 0$  (点)

(2) 一致连续： $\lim_{x_1 \rightarrow x_2} (f(x_1) - f(x_2)) = 0$  (区间)

## 7 理解卷积运算： $x + y$ 恒等于 $n$ ，从图像上看像卷毛巾一样。

(1) 离散： $(f * g)(n) = \sum_{\tau=-\infty}^{\tau=\infty} f(\tau) \cdot g(n - \tau)$

(2) 连续： $(f * g)(n) = \int_{\tau=-\infty}^{\tau=\infty} f(\tau) \cdot g(n - \tau) d\tau$

在卷积神经网络中，卷积常用于平滑图像，i.e.把高频信号和周围的平均一下。

## 8 用牛顿迭代法寻找高次多项式方程的解：

做任意点处的切线，和 $x$ 轴的交点作为迭代得到的新点，继续做该点的切线并寻找和 $x$ 轴的交点。反复执行直到达到收敛条件：

$$x_{n+1} \leftarrow x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

将牛顿迭代法推广到任意曲线需要该曲线在给定区间内存在一阶导。该方法不总是收敛，可能会距离解越来越远、反复震荡、漏解。

## 9 理解梯度的概念：梯度是超曲面的函数值增长最快的方向在自变量空间上的投影(这个说法并不准确，因为能够选择方向的就是自变量，“投影”一词的使用不严谨。理解我所表达的意思就好)。

(1) 以一元函数 $y = f(x)$ 为例，自变量空间是一维空间(即 $x$ 轴)。只有两个方向： $x$ 轴正方向和 $x$ 轴负方向。 $f'(x) > 0$ 表明往前走 $f(x)$ 会增大，梯度方向是 $x$ 轴正方向； $f'(x) < 0$ 表明往后走 $f(x)$ 会增大，梯度方向是 $x$ 轴负方向。

(2) 以二元函数 $z = f(x, y)$ 为例，自变量空间是二维空间( $xy$ 平面)，方向有无数个。梯度为 $\Delta z = \left(\frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial y}\right)^T$ ，这个向量的方向就是 $z$ 增长最快的方向。

(3) 梯度与等高线垂直。这是显然的，因为等高线上的函数值相同，只有这样才可以做到“不偏不倚”。

## 10 理解局部最优性的必要条件：

(1)  $\forall x \in \mathbb{R}^n, y = f(x) \in \mathbb{R}$ ，若 $x^*$ 为局部最优解且 $f$ 在 $x^*$ 邻域内一阶可导，则 $\nabla f(x^*) = 0$ 。

证明思路：将 $f$ 在 $x^*$ 处一阶泰勒展开 $f(x) = f(x^*) + \Delta x^T \nabla f(x^*)$ ，要在邻域内 $f(x^*)$ 最小，则恒有 $\Delta x^T \nabla f(x^*) \geq 0$ 。因为 $\Delta x$ 可正可负(左邻域和右邻域)，所以恒有 $\nabla f(x^*) = 0$ 。

(2)  $\forall x \in \mathbb{R}^n, y = f(x) \in \mathbb{R}$ ，若 $x^*$ 为局部最优解且 $f$ 在 $x^*$ 邻域内二阶可导，则 $\nabla f(x^*) = 0$ 且 $\nabla^2 f(x^*)$ 为半正定矩阵。



证明思路：将 $f$ 在 $x^*$ 处二阶泰勒展开 $f(x) = f(x^*) + \frac{1}{2}\Delta x^T \nabla^2 f(x^*) \Delta x$ ，要在邻域内 $f(x^*)$ 最小，

则恒有 $\frac{1}{2}\Delta x^T \nabla^2 f(x^*) \Delta x \geq 0$ ，所以 $\nabla^2 f(x^*)$ 半正定。

#### 11 掌握无约束非线性优化算法：

这里只是提一嘴，后面会写新的文档来详细描述。

最常用的无约束非线性优化算法是一维搜索，其核心是找到合适的迭代方向和每次迭代的最优步长。如果没有曲线信息可供利用（一阶、二阶甚至更高阶的导数），那么可以用黄金分割法、斐波那契法等方法缩小搜索区间，也可以借助多项式的强大表示能力执行插值法（牛顿法就是二点二次插值）；如果有信息可用，那么通常借助泰勒展开式获得迭代方向。具体地，如果有一阶信息可供利用，那么可以采用梯度法（最速下降法）及其一系列的改进方法；如果有二阶信息可供利用，那么可以采用牛顿法及其一系列的改进方法。牛顿法的两大问题分别是 Hessian 矩阵不总正定和 Hessian 矩阵的逆太难算。对于前者，改进策略是提出各种修正方案保证迭代方向一定是函数下降的方向；对于后者，改进策略是各种拟牛顿法（用别的矩阵来代替 Hessian 矩阵的逆）。此外，收敛速度介于梯度法和牛顿法之间的重要方法是共轭方向法，其本质上是保证每一次迭代都是有效的，即同一个迭代方向不会多次出现。

另一类无约束非线性优化的算法是信赖域方法。本质上，信赖域方法是在局部用二次型插值目标曲线，仍就是借助多项式的强大表示能力。

#### 12 理解拉格朗日乘子法（处理等式约束）：

设 $x \in \mathbb{R}^n$ ，目标函数为 $f(x)$ ，等式约束为 $g(x) = 0, h(x) = 0, \dots$ 。要求 $\min_x f(x)$ 。

(1) 有一个等式约束：在极值点目标函数曲线和约束函数曲线相切，根据梯度与等高线垂直这一结论，二者的梯度相互平行：即 $\Delta f + \lambda \Delta g = 0$ 。

(2) 有多个等式约束：在极值点目标函数曲线的梯度是多条约束函数曲线的梯度的线性组合：

$$\Delta f + (\lambda \Delta g + \mu \Delta h + \dots) = 0$$

(3) 因此，引入拉格朗日函数 $L(x) = f(x) + \lambda g(x) + \mu h(x) + \dots$ ，联立

$$\begin{cases} \Delta L(x) = 0 \\ g(x) = 0 \\ h(x) = 0 \\ \dots \end{cases}$$

即可求解极值点和 $\lambda$ 、 $\mu$ 等乘子的最优值。

#### 13 理解 KKT 条件（可处理不等式约束）：

设 $x \in \mathbb{R}^k$ ，目标函数为 $f(x)$ ，等式约束为 $g_i(x) = 0 |_{i=1, \dots, n}$ ，不等式约束为 $h_j(x) \leq 0 |_{j=1, \dots, m}$ 。要求 $\min_x f(x)$ 。

(1) 不等式约束没起作用：拉格朗日乘子法即可解决。

(2) 不等式约束起作用了：只可能在边界取得，因此不等式约束实际上通过等式约束来体现。那么同样有：在极值点目标函数曲线的梯度是多条约束函数曲线的梯度的线性组合。但是需要主要的是：在极值点目标函数曲线的梯度必然和这些线性组合后的向量方向相反。可总结为

$$\begin{cases} \Delta f + \sum_{i=1}^n \lambda_i \Delta g_i + \sum_{j=1}^m \mu_j \Delta h_j = 0 \\ h_j(x) = 0 |_{j=1, \dots, m} \\ \mu_j \geq 0 |_{j=1, \dots, m} \end{cases}$$

(3) 将两种情形整合到一起就有了 KKT 条件:

$$\begin{cases} \Delta f + \sum_{i=1}^n \lambda_i \Delta g_i + \sum_{j=1}^m \mu_j \Delta h_j = 0 \\ g_i = 0 |_{i=1, \dots, n} \\ h_j \leq 0 |_{j=1, \dots, m} \\ \mu_j \geq 0 |_{j=1, \dots, m} \\ h_j \mu_j = 0 |_{j=1, \dots, m} \end{cases}$$

最后一个是 KKT 互不条件。当  $\mu_j = 0$  时,  $h_j$  没有出现在拉格朗日函数中, 说明这个不等式约束没起作用, 即  $h_j \leq 0$  恒成立; 当  $\mu_j > 0$  时,  $h_j = 0$ , 说明  $h_j$  起作用了, 在边界上起的作用。正是这个条件将两种情形整合到了一起。

14 牢记矩阵微积分的运算规则:

(1) 矩阵微积分是用矩阵和向量表示因变量每个成分关于自变量每个成分的偏导数。灵活使用的技巧在于观察偏导的维度构成。

(2) 向量  $\rightarrow$  标量:  $\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall y = f(x) = f(x_1, \dots, x_p) \in \mathbb{R}, \frac{\partial y}{\partial x} = \left( \frac{\partial y}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial y}{\partial x_p} \right)^T \in \mathbb{R}^{p \times 1}$ 。

(3) 标量  $\rightarrow$  向量:  $\forall x \in \mathbb{R}, \forall y = f(x) \in \mathbb{R}^p, \frac{\partial y}{\partial x} = \left( \frac{\partial y_1}{\partial x}, \dots, \frac{\partial y_n}{\partial x} \right) \in \mathbb{R}^{1 \times p}$ 。

(4) 向量  $\rightarrow$  向量:  $\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall y = f(x) = f(x_1, \dots, x_p) \in \mathbb{R}^q,$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_q}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_p} & \dots & \frac{\partial y_q}{\partial x_p} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{p \times q}$$

(5) 加法法则:  $\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall y = f(x) \in \mathbb{R}^q, z = f(x) \in \mathbb{R}^q, \frac{\partial (y+z)}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial x} + \frac{\partial z}{\partial x} \in \mathbb{R}^{p \times q}$ 。

(6) 乘法法则:  $\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall y = f(x) \in \mathbb{R}^q, z = f(x) \in \mathbb{R}^q, \frac{\partial y^T z}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial x} z + \frac{\partial z}{\partial x} y$ 。(  $p \times 1 = (p \times q) \times (q \times 1)$  )

(7)  $\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall y = f(x) \in \mathbb{R}^s, z = f(x) \in \mathbb{R}^t, A \in \mathbb{R}^{s \times t}, \frac{\partial y^T A z}{\partial x} = \frac{\partial y}{\partial x} A z + \frac{\partial z}{\partial x} A^T y \in \mathbb{R}^{p \times 1}$ 。

(8)  $\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall y = f(x) \in \mathbb{R}, z = f(x) \in \mathbb{R}^q, \frac{\partial y z}{\partial x} = y \frac{\partial z}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial x} z^T \in \mathbb{R}^{p \times q}$ 。

(9)  $\forall x \in \mathbb{R}, u = u(x) \in \mathbb{R}^s, g = g(u) \in \mathbb{R}^t, \frac{\partial g}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial g}{\partial u} \in \mathbb{R}^{1 \times t}$ 。

(10)  $\forall x \in \mathbb{R}^p, u = u(x) \in \mathbb{R}^s, g = g(u) \in \mathbb{R}^t, \frac{\partial g}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} \cdot \frac{\partial g}{\partial u} \in \mathbb{R}^{s \times t}$ 。

$$(11) \quad \forall X \in \mathbb{R}^{p \times q}, u = u(X) \in \mathbb{R}^s, g = g(u) \in \mathbb{R}, \frac{\partial g}{\partial x_{ij}} = \frac{\partial u}{\partial x_{ij}} \cdot \frac{\partial g}{\partial u} \in \mathbb{R}.$$

(12) 将以上规则付诸实践，如：

$$\forall x \in \mathbb{R}^p, \frac{\partial x}{\partial x} = I \in \mathbb{R}^{p \times p};$$

$$\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall A \in \mathbb{R}^{q \times p}, \frac{\partial Ax}{\partial x} = A^T \in \mathbb{R}^{p \times q};$$

$$\forall x \in \mathbb{R}^p, \forall A \in \mathbb{R}^{p \times q}, \frac{\partial x^T A}{\partial x} = A \in \mathbb{R}^{p \times q}.$$

(13) Logistic 函数  $\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ :  $\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$ 。当输入为  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$  时，

$$\sigma'(x) = \text{diag}(\sigma(x) \odot (1 - \sigma(x))) \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

(14) SoftMax 函数（将多个输入的标量映射为一个离散概率分布）：

设输入为  $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ ，输出  $z = (z_1, \dots, z_n)^T$  定义为

$$z_i = \text{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{k=1}^n e^{x_k}}$$

我们来认真算一算 SoftMax 函数的导数怎么求解。  $z = \text{softmax}(x) = \frac{1}{\sum_{k=1}^n e^{x_k}} (e^{x_1}, \dots, e^{x_n})^T =$

$$\frac{\exp(x)}{\sum_{k=1}^n e^{x_k}} = \frac{\exp(x)}{I_n^T \exp(x)} \in \mathbb{R}^n, \text{ 其中 } I_n = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^n. \text{ 所以 } \frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial \left( \frac{\exp(x)}{I_n^T \exp(x)} \right)}{\partial x} = \frac{\partial \left( \exp(x) \cdot \frac{1}{I_n^T \exp(x)} \right)}{\partial x} =$$

$$\frac{\partial(\exp(x))}{\partial x} \cdot \frac{1}{I_n^T \exp(x)} + \frac{\partial \left( \frac{1}{I_n^T \exp(x)} \right)}{\partial x} \cdot [\exp(x)]^T = \frac{\text{diag}(\exp(x))}{I_n^T \exp(x)} - \left( \frac{1}{I_n^T \exp(x)} \right)^2 \cdot \frac{\partial(I_n^T \exp(x))}{\partial x} \cdot [\exp(x)]^T$$

（最后一步用 (9) 来做）。

$$\text{紧接着，根据 (6), } \frac{\partial(I_n^T \exp(x))}{\partial x} = \frac{\partial(\exp(x))}{\partial x} \cdot I_n + \frac{\partial I_n^T}{\partial x} \cdot [\exp(x)]^T = \text{diag}(\exp(x)) I_n = \exp(x).$$

$$\text{所以，原式} = \text{diag} \left( \frac{\exp(x)}{I_n^T \exp(x)} \right) - \frac{\exp(x)}{I_n^T \exp(x)} \cdot \frac{[\exp(x)]^T}{I_n^T \exp(x)} =$$

$$\text{diag}(\text{softmax}(x)) - \text{softmax}(x) \cdot [\text{softmax}(x)]^T$$

15 复数存在的意义是什么？

(1) 让我们从更高的维度去审视函数，从而获得更多未知的细节。复数虽然看起来和向量一样，但是实际上实数域的扩充，在本质上更接近实数。（相比之下，向量的乘法运算点积、叉积与实数乘法大不相同。）复数在计算上兼容实数，有加减乘除乘方开根号取对数等运算。

(2) 重点关心复数乘法：设  $z_1 = a + bi$ ，长度为  $|z_1|$ ，幅角为  $\arg(z_1)$ ；设  $z_2 = c + di$ ，长度为  $|z_2|$ ，幅角为  $\arg(z_2)$ 。则  $z_1 * z_2$  的长度为  $|z_1| * |z_2|$ ，幅角为  $\arg(z_1) + \arg(z_2)$ 。当  $z_2 = i$  时，其作用时让  $z_1$  逆时针旋转  $90^\circ$ 。

16 理解并推导欧拉公式：  $e^{i\theta} = \cos\theta + i \cdot \sin\theta$

(1) 掌握推导欧拉公式的三种方法。利用  $e^x$  的三种定义方式：

$$e^x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{x}{n} \right)^n$$

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!} x^2 + \frac{1}{3!} x^3 + \dots$$

$$e^x = \frac{d}{dx} e^x$$

进行推导。

- (2) 根据欧拉公式可知 $e^{i\theta}$ 是复平面上长度为1、幅角为 $\theta$ 的复数， $e^{i\theta}$ 的轨迹组成了复平面上的单位圆。任意复数可由欧拉公式表达为 $z = a + bi = re^{i\theta}$ ，且 $|z| = r$ ， $\arg(z) = \theta$ 。  
 设 $z_1 = r_1 e^{i\theta_1}$ ， $z_2 = r_2 e^{i\theta_2}$ ，则

$$\begin{aligned} z_1 * z_2 &= r_1 r_2 e^{i(\theta_1 + \theta_2)} \\ \frac{z_1}{z_2} &= \frac{r_1}{r_2} e^{i(\theta_1 - \theta_2)} \\ a^i &= e^{i \ln a} \end{aligned}$$

系数项乘（除）、指数相加（减），这种运算方式更接近实数，或许这才是复数的完整形态。

- (3) 当 $\theta = \pi$ 时，

$$e^{i\pi} + 1 = 0$$

这个公式中出现了零元、单位元、最基本的虚数 $i$ ，以及两个最常用的自然数 $\pi$ 和 $e$ 。这就是“上帝的公式”。

## 17 理解并推导傅里叶级数：

- (1) 光作为一种波，其颜色由各个组成光的振幅（ $a_n$ ）和频率（ $\frac{n}{2\pi}$ ）决定。光的色散现象就是

$$f(x) = \sum_n a_n \sin(nx)$$

- (2) 设 $f(x)$ 是周期性函数且周期为 $T$ ，满足傅里叶级数的收敛条件，则 $f(x)$ 可写作

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos \frac{2\pi nx}{T} + b_n \sin \frac{2\pi nx}{T} \right)$$

其中

$$\begin{cases} a_n = \frac{2}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} f(x) \cdot \cos \frac{2\pi nx}{T} dx \\ b_n = \frac{2}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} f(x) \cdot \sin \frac{2\pi nx}{T} dx \end{cases}$$

- (3) 傅里叶级数的本质是将任意周期函数（曲线）视为无数旋转的叠加。  
 傅里叶级数可视为圆周运动的组合：不断以做圆周运动的点为新的圆周运动的圆心继续做圆周运动。套娃的次数越多就越逼近该周期函数，选取不同的点和不同的半径就是在逼近不同的周期函数。不断增加的 $x$ 如同时间一样永不回头。
- (4) 傅里叶级数表达式的推导源自于对问题“任意周期函数是否可写成三角函数之和”的求解，核心思路如下：

$f(x) = C$ 是常函数，也是周期函数 → 要有常数项；

$\sin x$  和  $\cos x$  都要有，保证奇偶性；

需要  $\sin \frac{2\pi nx}{T}$  和  $\sin \frac{2\pi nx}{T}$ ，保证 $T$ 一定是其周期；

通过加减调节振幅。

请自行推导。此外，根据欧拉公式可得 $\cos \theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$ ， $\sin \theta = \frac{e^{i\theta} - e^{-i\theta}}{2}$ ，代入可得

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left( c_n \cdot e^{i \frac{2\pi n x}{T}} \right)$$

其中  $c_n = \frac{1}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} f(x) \cdot e^{-i \frac{2\pi n x}{T}} dx$ 。

通过引入欧拉公式我们进入了复平面。这使得我们可以在时域上观察流逝的时间和运动得到的周期曲线；在频率上观察圆周运动的频率。傅立叶级数本质上是线性分量的叠加， $\left\{ e^{i \frac{2\pi n x}{T}} \right\}_{n \in \mathbb{Z}}$

正是无限维向量空间中的一组单位正交基（可通过三角函数的点积为零验证），而  $c_n$  是基  $e^{i \frac{2\pi n x}{T}}$  上的系数。每一个基反映的是做不同圆周运动的旋转频率。实际上，系数  $a_n$  和  $b_n$  亦可通过在正交基上的投影得到。

(5) 什么是频域图？其实就是周期函数  $f(x)$  在不同频率上的基的振幅。以方波信号

$$f(x) = \begin{cases} 2, & 2k\pi \leq x \leq (2k+1)\pi \\ 0, & (2k-1)\pi \leq x \leq 2k\pi \end{cases}$$

为例，用傅里叶级数

$$1 + \frac{4}{\pi} \sin x + 0 \cdot \sin 2x + \frac{4}{3\pi} \sin 3x + 0 \cdot \sin 4x + \frac{4}{5\pi} \sin 5x$$

来逼近，那么基  $\{1, \sin x, \dots, \sin 5x\}$  上的系数向量为  $\left\{ 1, \frac{4}{\pi}, 0, \frac{4}{3\pi}, 0, \frac{4}{5\pi} \right\}^T$ 。在  $x$  轴上  $x = 0, \dots, 5$  的位置以系数向量对应的元素为高度绘制竖线，即可得到对应的频域图。

## 18 理解傅里叶变换：

傅里叶变换是用傅里叶级数去逼近任意非周期函数。如何逼近？令  $T \rightarrow \infty$ ！

$T$  越大，频率越小，频段的划分越密集。当  $T \rightarrow \infty$  时，基会铺满整个频谱，频域图上各个竖线的最高点将会联结成一条连续的曲线。

## 三 线性代数与矩阵理论

1  $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ，理论上，如何求解线性方程组  $Ax = b$ ？

(1) 若  $A$  为非奇异阵，则  $x = A^{-1}b$ 。根据克拉默法则可知  $x_i = \frac{|A_i|}{|A|}$ 。

(2) 若  $A$  为奇异阵且  $b \in \text{range}(A)$ ，则  $Ax = b$  有无穷解。

(3) 若  $A$  为奇异阵且  $b \notin \text{range}(A)$ ，则  $Ax = b$  无解。

如何理解？将  $A$  写作  $(a_1, \dots, a_n)^T$ ，则  $Ax = \sum_{i=1}^n x_i a_i$  是以  $\{a_1, \dots, a_n\}$  为基的线性组合。若  $b \in \text{range}(A)$  则  $\exists x$  使得  $\sum_{i=1}^n x_i a_i = b$ 。若  $\{a_1, \dots, a_n\}$  线性无关，则  $b$  只有一种表示方法，否则有无数种。这就对应着原方程组有唯一解和有无穷解。

一个矩阵是奇异的当且仅当它至少有一个特征值为零。

2 如何让计算机求解线性方程组  $Ax = b$ ？

依据克拉默法则计算  $x$  的复杂度为  $O(n^4)$ ，太慢！于是就诞生了高斯消去法——

(1) 如果  $A$  是下三角矩阵，则  $x$  非常容易计算。因为

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$

依次求解 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 即可，这就是前向算法。这个过程要求 $a_{ii} \neq 0 \forall i$ ，复杂度为 $O(n^2)$ 。

- (2) 如果 $A$ 是上三角矩阵，则有后向算法

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$

- (3) 如何将任意矩阵 $A$ 转换为上/下三角矩阵？通过初等变换——

每实施一次初等变换，相当于左乘一个对应的初等矩阵。初等矩阵是可逆的，只需按照相反的初等变换变换回来即可。由此可以得到矩阵可逆的等价定义：

任意方阵 $A$ 可逆  $\leftrightarrow$  和单位矩阵 $I$ 初等行变换等价。

并且： $(A|I) \approx (I|A^{-1})$ ，这就是初等变换法求矩阵的逆。

- (4) 我们有无无数种选择可以将 $A$ 通过初等变换转换为上三角矩阵。高斯消去法是固定了一个程式：

第 $i$ 轮高斯消去是将从第 $i+1$ 行到最后一行的第 $i$ 个元素依次通过和第 $i$ 行比较消为0。

上述程式可以将 $A$ 转换成下三角矩阵和上三角矩阵的乘积，请自行验证。这就是LU分解。由此得 $LUx = b$ ，其中 $L$ 为下三角矩阵， $U$ 为上三角矩阵，则先后使用前向算法和后向算法即可得到 $x$ 。

### 3 如何通过迭代求解线性方程组 $Ax = b$ ？

- (1) 对于大规模稀疏矩阵而言，更好的求解策略是迭代。因为 $x_i = \frac{b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij}x_j}{a_{ii}}$ ，所以可以得到

$$\text{Jacobi 迭代方法: } x_i^{(k+1)} \leftarrow \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

每次用最新的 $x_j |_{j=1, \dots, i-1}$ ，得到

$$\text{Gauss-Seidel 迭代方法: } x_i^{(k+1)} \leftarrow \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

- (2) 采用矩阵分解的方式表达迭代方程：

令 $D = \text{diag}(A)$ ， $E$ 是 $A$ 的严格下三角部分的负， $F$ 是 $A$ 的严格下三角部分的负，则 $A = D - E - F$ 。则对于Jacobi迭代方法有

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(E + F)x^{(k)} + D^{-1}b$$

对于Gauss-Seidel迭代方法有

$$x^{(k+1)} = (D - E)^{-1}Fx^{(k)} + (D - E)^{-1}b$$

如果左右乘上松弛变量则有 $\omega(D - E - F) = \omega x$ ，从而得到松弛法迭代公式

$$x^{(k+1)} = (D - \omega E)^{-1}(\omega F + (1 - \omega)D)x^{(k)} + (D - \omega E)^{-1}\omega b$$

### 4 深入理解矩阵：

- (1) 矩阵是执行线性变换的函数，变换的是基。将 $A$ 写作 $(a_1, \dots, a_n)^T$ ，则 $Ax = \sum_{i=1}^n x_i a_i$ ，坐标 $x_i$ 成了新的基 $a_i$ 上的系数。不过， $a_i$ 其实是用旧的基表示的。
- (2) 矩阵的乘法可以相应地被视为函数的复合。这就解释了为什么矩阵为什么不满足交换律。

### 5 行列式的本质是什么？

- (1) 行列式 $|A|$ 是方阵 $A$ 实施线性变换时的伸缩因子。

线性变换的几何直观：

变换前是直线的，变换后仍是直线；

直线比例保持不变；



变换前是原点的，变换后仍是原点。

相应地，

$$|A| \begin{cases} > 1: \text{对图形有放大作用} \\ = 1: \text{图形大小不变} \\ 0 < |A| < 1: \text{对图形有缩小作用} \\ = 0: \text{线性变换不可逆 ("覆水难收")} \\ < 0: \text{改变左右手规则} \end{cases}$$

(2) 行列式是新的基组成的平行 $n$ 面体的体积（是面积、体积这一观念在高维空间的扩展。）

(3) 为什么行列式为零时线性变换不可逆？

注意到只有方阵才有行列式，因此行列式为零意味着发生了维度坍塌或者线性伸缩，在这两种情况下均是无法原路返回的。因为我们不知道该返回到哪里。例如，从 $(1,2,3)^T$ 变换到 $(1,2)^T$ 是向 $xy$ 平面的投影，逆变换只能得到 $(1,2,\theta)^T$ ， $\theta$ 可以取任意值，无法确定 $\theta = 3$ 。

(4) 如果一个方阵和对角阵相似（即可对角化、可执行特征值分解），那么 $A$ 的行列式等于所有特征值的积，后面会谈到这一点。

## 6 秩的本质是什么？

(1) 秩是图形经过线性变换之后的空间维度。

(2) 秩是矩阵列空间的维度，且行秩=列秩。这是因为 $n = \text{rank}(\text{range}(A)) + \text{rank}(\text{null}(A))$ 且 $n = \text{rank}(\text{range}(A^T)) + \text{rank}(\text{null}(A))$ 。

(3) 显然有 $\text{rank}(A) = \min\{m, n\}$ 。

## 7 理解相似矩阵 ( $B = P^{-1}AP$ ):

(1) 相似性只定义在方阵上。

后续还有不少观念也是只定义在方阵上的，请根据上下文自行判断。

(2) 线性变换是通过指定基下的矩阵来表达的，相似矩阵则是站在不同角度（另一组基）观察同一个线性变换。客观存在的一个点，不因为我们的观测角度发生了变化而变化，但是会有不同的坐标值。

(3) 为什么我们关心相似矩阵？相似矩阵本质上坐标变换（切换观测角度），所以我们可以借助相似性将一个矩阵切换到更简单的表达方式上来理解。怎样的表达算简单呢？对角阵！这就是对角化。在这种思路的引导下，诞生了特征值分解。

(4) 只要两个矩阵相似，它们的行列式就相同。这一点用 $|B| = |P^{-1}| \cdot |A| \cdot |P|$ 很容易得到。行列式是相似矩阵之间的相似不变量。如果和对角阵相似（即可对角化、可执行特征值分解），那么 $A$ 的行列式就十分容易计算，就是所有特征值的积。

(5) 相似矩阵具有完全相同的特征值和特征向量。这一点用 $|B - \lambda I| = |P^{-1}AP - P^{-1}\lambda IP| = |A - \lambda I|$ 即可证明。

## 8 如何理解特征值和特征向量？

(1) 将向量看成线性空间中的一个点，那么左乘矩阵可以看成是对点施加的一种运动（使点发生位移）。特征值反映了运动的速度，而特征向量则反映了运动的方向。线性变换是各个方向上不同速度的运动的叠加。从这个理解出发，就会想明白为什么对于向量 $x$ ，不断左乘 $A$ ， $x$ 会不断贴合到 $A$ 最大特征值对应的特征空间上。实际上，这正是特征向量的一种迭代求法。从这个理解出发，也会明白为什么相似矩阵具有完全相同的特征值和特征向量（因为客观存在的运动方向和速度不会随着观测角度的变化而变化）。

(2) 特征空间：将同一个特征值所对应的（数个）特征向量视为基，所张成的空间。特征空间中基的个数与对应的特征值重根的个数相等。

(3) 为什么对方阵 $A$ 可以用 $|A - \lambda I| = 0$ 来求解其特征值和特征向量?

求证思路: 根据特征值和特征向量的定义, 即 $Ax = \lambda x$ 恒成立, 即 $(A - \lambda I)x = 0$ 。这是一个线性方程组, 意味着将任意向量投射到零空间内, 那么 $A - \lambda I$ 作为一个线性变换所对应的伸缩因子必须恒为0, 即行列式为0。

## 9 深入理解正交性:

(1) 正交集 (orthogonal set): 两两正交的向量的集合。如果一个正交集不含零向量, 则这个正交集线性无关。(证明思路:  $0 = c_1 v_1 + \dots + c_p v_p \leftrightarrow 0 = 0 \cdot v_i = (c_1 v_1 + \dots + c_p v_p) \cdot v_i$ , 由 $v_i \cdot v_j = 0 |_{i \neq j}$ 可知 $c_i = 0$ 。) 因此正交集可以作为向量空间 $\mathbb{R}^p$ 的一组正交基。

进一步地, 可定义单位正交集 (orthonormal set)。

(2) 对任意向量 $y \in \mathbb{R}^p$ , 如何求解 $y$ 在一组正交基 $\{v_1, \dots, v_p\}$ 各个基上的坐标 (系数)? 设 $y = \sum_{i=1}^p c_i v_i$ , 则

$$c_i = \frac{y \cdot v_i}{v_i \cdot v_i}$$

这个结论亦可用于正交投影时各个分量上坐标的计算。

(3) 正交矩阵/酉矩阵 (orthogonal matrix/unitary matrix): 拥有单位正交的列向量和行向量的方阵 (因此更合理的名称应当是“单位正交矩阵 (orthonormal matrix)”)。正交矩阵 $U$ 满足 $U^{-1} = U^T$ 。这是一个非常优越的性质。因为很多运算涉及到求解矩阵的逆, 计算机对一般的矩阵求逆的复杂度很高。如果能和正交矩阵扯上关系, 就会方便处理很多。实际上QR分解和特征值分解就是这么干的。

证明思路:  $U = (u_1, \dots, u_n)$ ,  $U^T = (u_1^T, \dots, u_n^T)^T$ , 乘一下即得证。

若 $U$ 是列向量相互单位正交的矩阵且非方阵, 仍然有 $U^T U = I$ 。

(4) 左乘正交阵是在实施旋转变换, 这是因为 $|U^T U| = 1$ 。

(5) 如何从任意一组基 $\{x_1, \dots, x_n\}$ 中构造出一组正交基 $\{q_1, \dots, q_n\}$ ?

$$\begin{aligned} q_1 &= x_1 \\ q_2 &= x_2 - \frac{x_2 \cdot q_1}{q_1 \cdot q_1} q_1 \\ q_3 &= x_3 - \frac{x_3 \cdot q_1}{q_1 \cdot q_1} q_1 - \frac{x_3 \cdot q_2}{q_2 \cdot q_2} q_2 \\ &\vdots \\ q_n &= x_p - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{x_i \cdot q_i}{q_i \cdot q_i} q_i \end{aligned}$$

将 $x_2$ 正交分解, 其中一个分量在 $q_1$ 上, 系数为 $\frac{x_2 \cdot q_1}{q_1 \cdot q_1}$ , 另一个分量就是 $q_2$ 。后续的过程均是如此。

每次得到的 $q_i$ 是 $x_i$ 在现有的基上分解完毕之后的补。若要求构造出一组单位正交基 $\{q_1, \dots, q_n\}$ , 只需在上述每个步骤后面附上单位化的操作:

$$\forall j \in [1, \dots, n]: q_j = x_j - \sum_{i=1}^{j-1} (x_j \cdot q_i) q_i, \quad q_j = \frac{q_j}{\|q_j\|}$$

仔细观察上式, 若将 $x_j \cdot q_i$ 记为 $r_{ij}$  ( $1 \leq i < j \leq n$ ), 将 $\|q_j\|$ 记为 $r_{jj}$ , 则 $R = (r_{ij})_{n \times n}$ 是一个上三角矩阵。将 $(q_1, \dots, q_n)$ 记为 $Q$ , 则 $X = QR$ 。也就是说, 我们将任意矩阵 $X$ 分解成了一个正交阵和上三角矩阵的乘积, 这就是QR分解。类似于高斯消去法, 这个分解也可以拿来求解线性方程组:

$$QRx = b, \text{ 令 } Rx = y \rightarrow y = Q^T b$$

$$Rx = y \rightarrow \text{前向算法}$$

## 10 如何理解特征值分解?

- (1) 特征值分解其实就是对角化。 $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $A$  可对角化 ( $A = PDP^{-1}$ ) 当且仅当  $A$  有  $n$  个线性无关的特征向量。其中  $P = (p_1, \dots, p_n)$  是  $n$  个特征向量组成的矩阵,  $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  是由特征值组成的对角阵。

证明思路: 由  $Ap_i = \lambda_i p_i, i=1, \dots, n$  可得  $AP = A(p_1, \dots, p_n) = (Ap_1, \dots, Ap_n) = (\lambda_1 p_1, \dots, \lambda_n p_n) = (p_1, \dots, p_n)D = PD$ , 若  $\{p_1, \dots, p_n\}$  线性无关则  $P$  可逆, 从而有  $A = P^{-1}DP$ 。

这个结论就是特征值分解。

- (2) 性质:  $A^k = P^{-1}D^kP$ 。这个性质再一次验证了不断左乘  $A$ ,  $x$  会不断贴合到最大特征值对应的特征空间上。因为特征值呈指数增长, 很小的特征值将会非常小, 相应的运动几乎可以忽略不计; 而最大的特征值将会非常大, 对应的运动将明显占据主导地位。
- (3) 为什么我们关心对称矩阵 ( $A = A^T$ )? 因为对称阵在执行特征值分解时具备许多优秀的性质, 包括:

对称阵有  $n$  个实特征值 (包括重根);

对称阵的各个特征空间两两正交;

对称阵可以正交对角化。

所谓正交对角化是:  $\forall A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $A$  可正交对角化当且仅当存在正交阵  $P$  和对角阵  $D$  使得  $A = PDP^{-1} = PDP^T$ 。在这种情况下,  $P$  和  $P^{-1}$  作为正交阵对应的是方向相反的旋转变换, 而  $D$  对应的则是伸缩变换。显然, 旋转变换其实就是切换了观测角度而已, 我们更关心伸缩变换。因此正交对角化可用于“规范化二次型”, 相当于把矩阵“扶正”。

- (4) 方阵  $A$  可以正交对角化当且仅当  $A$  是对称阵。
- (5) 根据对称阵可正交对角化这一性质, 可得到谱分解定理 (每个分量  $\lambda_i u_i u_i^T$  是  $A$  的一个 spectrum):

$$A = \lambda_1 u_1 u_1^T + \dots + \lambda_n u_n u_n^T$$

证明思路: 令  $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ ,  $P = (u_1, \dots, u_n)$ , 则  $DP^T = (\lambda_1 u_1^T, \dots, \lambda_n u_n^T)^T$ 。所以  $PDP^T = (u_1, \dots, u_n)(\lambda_1 u_1^T, \dots, \lambda_n u_n^T)^T = \sum_{i=1}^n u_i \lambda_i u_i^T$  (看成行向量和列向量的乘法)。

每个分量其实记录了一部分信息。如果将分量按照降序排列, 则省略末位的一个或多个分量就实现了信息的压缩。(前 20% 的分量可能占据了 90% 的有效信息)

### (6) 执行特征值分解的步骤:

## 11 理解二次型:

- (1) 对于一个二次函数 (方程), 增加非二次项, 不会改变曲线的形状, 只会在  $xy$  轴上产生一些旋转、平移的效果。因此, 研究二次函数 (方程) 的性质, 只关心二次部分就够了。值包含二次部分的函数 (方程) 被称为二次齐次函数 (方程)。
- (2) 显然可以通过对称矩阵来描述二次齐次函数 (方程)。例如

$$ax^2 + 2bxy + cy^2 \leftrightarrow [x \ y] \begin{bmatrix} a & b \\ b & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \leftrightarrow x^T A x$$

可以将对称阵正交对角化  $A = PDP^T$ , 只保留伸缩变换的部分。在图像上, 这就是将二次型对应的函数 (方程) 的曲线扶正。

- (3) 对于二次函数  $f(x) = x^T A x$ , 若  $\forall x \in \mathbb{R} \wedge x \neq 0, f(x) > 0$ , 则  $f(x)$  是正定二次型,  $A$  是正定矩阵。同理可定义半正定矩阵、负定矩阵、半负定矩阵。
- (4) 判断一个对称阵  $A$  是否是正定矩阵的重要方法是对其执行正交对角化  $A = PDP^T$ , 若  $D$  中每一个特征值都大于零, 则正定。同理可判定是否为半正定矩阵、负定矩阵、半负定矩阵。为什么可

以这样判断？这是因为 $x^T Ax$ 和 $x^T Dx$ 本质是一样的，后者只是移除了其中旋转的部分。那么就得到了 $d_{11}x^2 + d_{22}y^2$ ，只有当 $d_{11}$ 和 $d_{22}$ 都恒大于零时才可以保证 $d_{11}x^2 + d_{22}y^2$ 恒大于零。

- (5)  $f(x) = x^T Ax$  (s.t.  $\|x\| = 1$ ) 在何时取得极值？

当 $A$ 为对称阵时， $f(x)$ 的最大值为 $A$ 的最大特征值， $f(x)$ 的最小值为 $A$ 的最小特征值。

这个结论可以通过拉格朗日乘子法得到。

证明思路：当 $A$ 为对称阵时，对 $A$ 执行正交对角化，则 $f(x) = (P^T x)^T D (P^T x)$ ， $P^T$ 作为正交阵只对 $x$ 产生旋转变换，不改变其二范数，故 $f(x) = f(y) = y^T Dy$ ，展开再使用拉格朗日乘子法即可。

## 12 如何理解奇异值分解？

### 13 矩阵的迹的本质什么？

- (1) 迹是矩阵对角线元素之和。
- (2) 如果两个矩阵相似，那么它们的迹相同。迹与观测空间无关，也是相似矩阵之间的相似不变量。如果和对角阵相似（即可对角化、可执行特征值分解），那么 $A$ 的迹等于所有特征值的和。
- (3) 行列式和迹均为相似变换中的不变量，是让相似矩阵拥有同一内核的本质原因。它们全部被特征值表达了出来。

### 14 什么是仿射变换？

- (1) 仿射变换的几何直观：

变换前是直线的，变换后依然是直线；

直线比例保持不变。

和线性变换相比，仿射变换无法保证变换前是原点的，变换后依然是原点。这是因为仿射变换在线性变换的基础上又执行了向量加法（ $y = Ax + b$ ）。

- (2) 可以在高维度通过线性变换实现低维度的仿射变换。

## 15 理解并推导主成分分析（PCA）：

- (1) PCA 的本质是找新的基和原始数据在新的基上的系数，使得新的基所包含的信息尽可能多。新基的个数小于原始数据的基的个数，从而实现降维。

## 后记

本来只是想总结一下两三个月以来对一些数学观念的深入理解，没想到洋洋洒洒写了这么多。尽管页数不少，但本文档仅仅列出了每一条的核心观点或求证思路，细节并没有给出。这是因为我对重复性劳动深恶痛绝<sup>②</sup>。但是我相信本文一定会给看得进去的人带去许多惊喜。在内容上，本文档部分参考了“马同学”的文章和春夏学期开设的《计算机应用数学》课程讲义。

促使我写作本文档的另一个重要原因是当前国内缺乏从本科生数学到科研论文数学及算法的跳板教材。本科时讲的太浅，甚至仍然以期末应试为目标；读研时高深的算法又看不懂，做科研=灌水。这是因为两者之间存在很大的鸿沟。本文当然无意于充当跳板教材的角色，但是我相信它一定会让科研工作者对一些数学观念有更加深刻的认知。

本文档会保持持续更新。最新版本可以在<http://hliangzhao.me/notes/math.pdf> 下载。

有任何疑问欢迎讨论交流<sup>③</sup>：hliangzhao@zju.edu.cn。