

# 机器学习的数学笔记

X

# 目录

符号表	ii
<b>1 逻辑回归</b>	<b>1</b>
1.1 二项逻辑回归模型 . . . . .	1
1.2 Softmax回归模型 . . . . .	3
<b>2 主成分分析</b>	<b>6</b>
2.1 主成分分析的算法 . . . . .	6
2.2 主成分分析的数学原理 . . . . .	7
<b>3 附录：信息熵</b>	<b>10</b>
3.1 相关概念 . . . . .	10
3.2 熵的性质 . . . . .	12
参考文献	17
索引	18

# 符号表

下面列出了本文所用的数学符号对照表，具体可参照Goodfellow *et al.* (2016)的2-4章节。

## 数字和数组

$a$	标量(整数或实数)
$\mathbf{a}$	向量(矢量)
$\mathbf{A}$	矩阵
$\mathbf{A}$	张量
$\mathbf{I}_n$	$n$ 行 $n$ 列的单位矩阵
$\mathbf{I}$	单位矩阵，维度参见上下文
$\mathbf{e}^{(i)}$	标准基向量 $[0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0]$ ，其中第 $i$ 位为 1
$\text{diag}(\mathbf{a})$	正方形对角矩阵，其中对角线元素为 $\mathbf{a}$
$a$	随机变量，标量
$\mathbf{a}$	随机变量，向量
$\mathbf{A}$	随机变量，矩阵

## 集合和图

$\mathbb{A}$	集合
$\mathbb{R}$	实数集合
$\{0, 1\}$	包含 0 和 1 的集合
$\{0, 1, \dots, n\}$	从 0 到 $n$ 的所有整数的集合
$[a, b]$	$a$ 到 $b$ 的实数闭区间
$(a, b]$	$a$ 到 $b$ 的实数半开区间
$\mathbb{A} \setminus \mathbb{B}$	差集, 即集合包含了在 $\mathbb{A}$ 中但不在 $\mathbb{B}$ 中的元素
$\mathcal{G}$	图
$Pa_{\mathcal{G}}(\mathbf{x}_i)$	图 $\mathcal{G}$ 中节点 $\mathbf{x}_i$ 的双亲

## 角标

$a_i$	向量 $\mathbf{a}$ 的第 $i$ 个元素, 其中角标从 1 开始
$a_{-i}$	向量 $\mathbf{a}$ 除第 $i$ 个元素以外的所有元素
$A_{i,j}$	矩阵 $\mathbf{A}$ 的第 $i$ 行第 $j$ 列的元素
$\mathbf{A}_{i,:}$	矩阵 $\mathbf{A}$ 的第 $i$ 行
$\mathbf{A}_{:,i}$	矩阵 $\mathbf{A}$ 的第 $i$ 列
$A_{i,j,k}$	3-D 张量 $\mathbf{A}$ 的元素 $(i, j, k)$
$\mathbf{A}_{:,:,i}$	3-D 张量的 2-D 切片
$\mathbf{a}_i$	随机向量 $\mathbf{a}$ 的第 $i$ 个元素

## 线性代数

$\mathbf{A}^{\top}$	矩阵 $\mathbf{A}$ 的转置
$\mathbf{A}^{+}$	矩阵 $\mathbf{A}$ 的摩尔彭罗斯伪逆 (广义逆)
$\mathbf{A} \odot \mathbf{B}$	矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 的元素积 (Hadamard 乘积)
$\det(\mathbf{A})$	矩阵 $\mathbf{A}$ 的行列式

## 微积分

$\frac{dy}{dx}$	$y$ 关于 $x$ 的导数
$\frac{\partial y}{\partial x}$	$y$ 关于 $x$ 的偏导数
$\nabla_{\mathbf{x}} y$	$y$ 关于向量 $\mathbf{x}$ 的梯度
$\nabla_{\mathbf{X}} y$	$y$ 关于矩阵 $\mathbf{X}$ 的导数
$\nabla_{\mathbf{X}} y$	$y$ 关于张量 $\mathbf{X}$ 的导数
$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}$	$f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ 的雅克比矩阵 $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
$\nabla_{\mathbf{x}}^2 f(\mathbf{x})$ or $\mathbf{H}(f)(\mathbf{x})$	$f$ 在输入向量 $\mathbf{x}$ 的海森矩阵
$\int f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$	在整个定义域上 $f$ 关于 $\mathbf{x}$ 的定积分
$\int_{\mathbb{S}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$	在集合 $\mathbb{S}$ 上 $f$ 关于 $\mathbf{x}$ 的定积分

## 概率论与信息论

$\mathbf{a} \perp \mathbf{b}$	随机变量 $\mathbf{a}$ 与 $\mathbf{b}$ 相互独立
$\mathbf{a} \perp \mathbf{b} \mid \mathbf{c}$	随机变量 $\mathbf{a}$ 与 $\mathbf{b}$ 对于给定的 $\mathbf{c}$ 条件独立
$P(\mathbf{a})$	离散变量的概率分布
$p(\mathbf{a})$	连续变量的概率分布或类型不确定的变量的概率分布
$\mathbf{a} \sim P$	随机变量 $\mathbf{a}$ 服从 $P$ 分布
$\mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim P}[f(\mathbf{x})]$ or $\mathbb{E}f(\mathbf{x})$	$f(\mathbf{x})$ 在概率分布 $P(\mathbf{x})$ 的期望
$\text{Var}(f(\mathbf{x}))$	$f(\mathbf{x})$ 在概率分布 $P(\mathbf{x})$ 下的方差
$\text{Cov}(f(\mathbf{x}), g(\mathbf{x}))$	$f(\mathbf{x})$ 和 $g(\mathbf{x})$ 在概率分布 $P(\mathbf{x})$ 下的协方差
$H(\mathbf{x})$	随机变量 $\mathbf{x}$ 的信息熵
$D_{\text{KL}}(P \parallel Q)$	随机变量 $P$ 与 $Q$ 的相对熵(KL散度)
$\mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$	均值为 $\boldsymbol{\mu}$ 方差为 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 $\mathbf{x}$ 的高斯分布

## 函数

$f: \mathbb{A} \rightarrow \mathbb{B}$	定义域为 $\mathbb{A}$ 值域为 $\mathbb{B}$ 的函数 $f$
$f \circ g$	函数 $f$ 和 $g$ 的复合函数
$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$	参数为 $\boldsymbol{\theta}$ 的关于 $\mathbf{x}$ 的函数. (有时我们写作 $f(\mathbf{x})$ 而忽略参数 $\boldsymbol{\theta}$ 来简化符号)
$\log x$	$x$ 的自然对数
$\sigma(x)$	Logistic sigmoid 函数, $\frac{1}{1 + \exp(-x)}$
$\zeta(x)$	Softplus 函数, $\log(1 + \exp(x))$
$\ \mathbf{x}\ _p$	$\mathbf{x}$ 的 $L^p$ 范数
$\ \mathbf{x}\ $	$\mathbf{x}$ 的 $L^2$ 范数
$x^+$	$x$ 的正值部分, 即 $\max(0, x)$
$\mathbf{1}_{\text{condition}}$	如果条件为真则值为1, 条件为假则值为0

有时我们把参数为标量的函数  $f$  应用到矢量、矩阵或张量中:  $f(\mathbf{x})$ ,  $f(\mathbf{X})$ , 或  $f(\mathbf{X})$ 。这代表着将  $f$  应用到数组元素层面, 例如, 如果  $\mathbf{C} = \sigma(\mathbf{X})$ , 那么任意  $i, j$  和  $k$ , 都有  $C_{i,j,k} = \sigma(X_{i,j,k})$

## 数据集和分布

$p_{\text{data}}$	数据生成的概率分布
$\hat{p}_{\text{data}}$	训练集生成(定义)的经验分布
$\mathbb{X}$	训练集
$\mathbf{x}^{(i)}$	数据集中的第 $i$ 个(输入)实例
$y^{(i)}$ or $\mathbf{y}^{(i)}$	有监督学习下 $\mathbf{x}^{(i)}$ 对应的标记
$\mathbf{X}$	$m \times n$ 的矩阵, 其中输入实例 $\mathbf{x}^{(i)}$ 在 $\mathbf{X}_{i,:}$ 行

# Chapter 1

## 逻辑回归

### 1.1 二项逻辑回归模型

二项逻辑回归模型是如下的条件概率分布

$$P(Y = 1|\mathbf{x}) = \frac{\exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x} + b)}{1 + \exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x} + b)}$$
$$P(Y = 0|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x} + b)}$$

其中 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 是输入变量， $Y \in \{0, 1\}$ 是输出变量， $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^n$ 和 $b \in \mathbb{R}$ 是参数。 $\mathbf{x}$ 和 $\boldsymbol{\theta}$ 为 $n$ 维列向量。

若令 $\boldsymbol{\theta} = (\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(n)}, b)^T$ ， $\mathbf{x} = (x^{(1)}, \dots, x^{(n)}, 1)^T$ ，那么条件概率可以表示为

$$P(Y = 1|\mathbf{x}) = \frac{\exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x})}{1 + \exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x})}$$
$$P(Y = 0|\mathbf{x}) = \frac{1}{1 + \exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x})} \tag{1.1}$$

#### 1.1.1 模型的参数估计

对于给定的训练集 $\mathbb{X} = \{(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_N, y_N)\}$ ，可应用极大似然估计法估计模型参数。

为表示方便，令 $P(Y = 1|\mathbf{x}) = \pi(\mathbf{x})$ ， $P(Y = 0|\mathbf{x}) = 1 - \pi(\mathbf{x})$ ，似然函数为

$$L(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^N (\pi(\mathbf{x}_i))^{y_i} (1 - \pi(\mathbf{x}_i))^{1-y_i}$$

那么对数似然函数为

$$\begin{aligned}
 \log L(\boldsymbol{\theta}) &= \sum_{i=1}^N (y_i \log \pi(\mathbf{x}_i) + (1 - y_i) \log(1 - \pi(\mathbf{x}_i))) \\
 &= \sum_{i=1}^N \left( y_i \log \frac{\pi(\mathbf{x}_i)}{1 - \pi(\mathbf{x}_i)} + \log(1 - \pi(\mathbf{x}_i)) \right) \\
 &= \sum_{i=1}^N (y_i (\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}_i) - \log(1 + \exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}_i)))
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

### 1.1.1.1 参数估计：梯度下降法

根据公式 (1.2)，对数似然函数对 $\boldsymbol{\theta}$ 的偏导为

$$\begin{aligned}
 \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \log L(\boldsymbol{\theta}) &= \sum_{i=1}^N \left( y_i \mathbf{x}_i - \frac{\exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}_i) \mathbf{x}_i}{1 + \exp(\boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x}_i)} \right) \\
 &= \sum_{i=1}^N (y_i - \pi(\mathbf{x}_i)) \mathbf{x}_i
 \end{aligned}$$

由此处求对数似然函数的最大值，故需要沿着梯度上升的方向进行迭代，迭代公式为

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\theta} &:= \boldsymbol{\theta} + \alpha \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} \log L(\boldsymbol{\theta}) \\
 &= \boldsymbol{\theta} + \alpha \sum_{i=1}^N (y_i - \pi(\mathbf{x}_i)) \mathbf{x}_i
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

其中 $\alpha$ 称为学习率，是一个正常数。

公式 (1.3)可以用矩阵表示

$$\boldsymbol{\theta} := \boldsymbol{\theta} + \alpha X^T \boldsymbol{\Lambda} \tag{1.4}$$

其中 $\boldsymbol{\Lambda} = \begin{pmatrix} y_1 - \pi(\mathbf{x}_1) \\ y_2 - \pi(\mathbf{x}_2) \\ \dots \\ y_N - \pi(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix}_{N \times 1}$ ， $X$ 是由训练数据构成的 $N \times (n + 1)$ 矩阵(每一行对应一个样本，每一列对应样本的一个维度，其中还包括一维常数项)。

### 1.1.1.2 参数估计：随机梯度下降法

梯度下降算法在每次更新回归系数时需要遍历整个数据集，当数据集数量庞大或者



特征过多时，该方法的计算复杂度太高。改进方法是每次迭代仅用一个样本来更新回归系数，称为随机梯度下降法。

具体而言，对于训练集中的每一个样本 $(x_i, y_i)$ ，计算该样本梯度，并依据迭代公式：

$$\boldsymbol{\theta} := \boldsymbol{\theta} + \alpha (y_i - \pi(\mathbf{x}_i)) \mathbf{x}_i \quad (1.5)$$

与公式 (1.3) 相比，随机梯度下降的迭代公式 (1.5) 中

- 误差变量是数值，而不是向量
- 不再有矩阵变换的过程

所以随机梯度下降算法的计算效率较高，缺点是存在解的不稳定性(如解存在周期性波动)的问题。为了解决这一问题，并进一步加快收敛速度，可以通过随机选取样本来更新回归系数。

## 1.2 Softmax回归模型

Softmax模型是二项回归模型在多分类问题上的推广，在多分类问题中，类标签 $Y$ 可以取两个以上的值。

假设 $Y$ 的取值集合是 $\{1, 2, \dots, K\}$ ，Softmax模型是如下的条件概率分布

$$P(Y = k | \mathbf{x}) = \frac{\exp(\boldsymbol{\theta}_k^T \mathbf{x})}{\sum_{j=1}^K \exp(\boldsymbol{\theta}_j^T \mathbf{x})} \quad (1.6)$$

其中 $\boldsymbol{\theta}_1, \dots, \boldsymbol{\theta}_K \in \mathbb{R}^{n+1}$  是模型的参数。

为方便起见，下文用矩阵 $\boldsymbol{\Theta}_{K \times (n+1)}$ 表示全部的模型参数

$$\boldsymbol{\Theta} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\theta}_1^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{\theta}_K^T \end{bmatrix}$$

### 1.2.1 模型的参数估计

令 $P(Y = k | \mathbf{x}) = \pi_k(\mathbf{x})$ ，与二项逻辑回归类似，Softmax的似然函数可以表示为

$$L(\boldsymbol{\Theta}) = \prod_{i=1}^N \prod_{k=1}^K (\pi_k(\mathbf{x}_i))^{1_{y_i=k}}$$

对数似然函数为

$$\log L(\Theta) = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \mathbf{1}_{y_i=k} \log \pi_k(\mathbf{x}_i) \quad (1.7)$$

### 1.2.1.1 参数估计：梯度下降法

首先求

$$\frac{\partial \pi_k(\mathbf{x}_i)}{\partial \theta_k} = \frac{\mathbf{x}_i \exp(\theta_k^T \mathbf{x}_i) \left( \sum_{j=1}^K \exp(\theta_j^T \mathbf{x}) - \exp(\theta_k^T \mathbf{x}_i) \right)}{\left( \sum_{j=1}^K \exp(\theta_j^T \mathbf{x}) \right)^2} \quad (1.8)$$

故根据公式 (1.7)，得到Softmax模型的对数似然函数的梯度

$$\begin{aligned} \nabla_{\theta_k} \log L(\Theta) &= \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{y_i=k} \frac{1}{\pi_k(\mathbf{x}_i)} \frac{\partial \pi_k(\mathbf{x}_i)}{\partial \theta_k} \\ &= \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{y_i=k} \frac{1}{\pi_k(\mathbf{x}_i)} \frac{\mathbf{x}_i \exp(\theta_k^T \mathbf{x}_i) \left( \sum_{j=1}^K \exp(\theta_j^T \mathbf{x}_i) - \exp(\theta_k^T \mathbf{x}_i) \right)}{\left( \sum_{j=1}^K \exp(\theta_j^T \mathbf{x}_i) \right)^2} \\ &= \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{y_i=k} \frac{\mathbf{x}_i \left( \sum_{j=1}^K \exp(\theta_j^T \mathbf{x}_i) - \exp(\theta_k^T \mathbf{x}_i) \right)}{\sum_{j=1}^K \exp(\theta_j^T \mathbf{x}_i)} \\ &= \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{y_i=k} \mathbf{x}_i (1 - \pi_k(\mathbf{x}_i)) \end{aligned} \quad (1.9)$$

对于任意第 $k$ 个分类的参数 $\theta_k$ ，可沿着梯度上升的方向进行迭代

$$\theta_k := \theta_k + \alpha \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{y_i=k} \mathbf{x}_i (1 - \pi_k(\mathbf{x}_i)) \quad (1.10)$$

公式 (1.10)的迭代关系用矩阵可以表示为

$$\theta_k := \theta_k + \alpha X^T \Lambda \quad (1.11)$$

其中  $\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{y_1=k}(1 - \pi_k(\mathbf{x}_1)) \\ \mathbf{1}_{y_2=k}(1 - \pi_k(\mathbf{x}_2)) \\ \dots \\ \mathbf{1}_{y_N=k}(1 - \pi_k(\mathbf{x}_N)) \end{pmatrix}_{N \times 1}$  ,  $X$ 是由训练数据构成的  $N \times (n + 1)$ 矩阵(每一行对应一个样本, 每一列对应样本的一个维度, 其中还包括一维常数项)。

# Chapter 2

## 主成分分析

主成分分析（Principal Component Analysis, PCA）是一种常见的**数据降维**方法，其目的是在信息量损失较小的前提下，将高维的数据转换到低维，从而减小计算量。实质就是找到一些投影方向，使得数据在这些投影方向上包含的信息量最大，而且这些投影方向是相互正交的。选择其中一部分包含最多信息量的投影方向作为新的数据空间，同时忽略包含较小信息量的投影方向，从而达到降维的目的。

样本的**信息量**可以理解为是样本在特征方向上投影的方差。方差越大，则样本在该特征上的差异就越大，因此该特征就越重要。参见《机器学习实战》上的图，在分类问题里，样本的方差越大，越容易将不同类别的样本区分开。

PCA的数学原理，就是对原始的空间中顺序地找一组相互正交的坐标轴，第一个轴是使得方差最大的，第二个轴是在与第一个轴正交的平面中使得方差最大的，第三个轴是在与第1、2个轴正交的平面中方差最大的，这样假设在N维空间中，可以找到N个这样的坐标轴，取前r个去近似这个空间，这样就从一个N维的空间压缩到r维的空间了，但是最终选择的r个坐标轴能够使得数据的损失最小。

### 2.1 主成分分析的算法

假设

- 存在n个原始数据，每个数据有p个特征，用矩阵表示为 $\mathbf{Z}_{n \times p} = (\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_n)^T$ ，其中 $\mathbf{z}_i$ 为p维列向量。

1. 去除平均值，即中心化，将数据**中心化**变换为 $\mathbf{X}_{n \times p} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n)^T$ ，其中 $\mathbf{X} =$

$Z - \mathbb{E}Z$  (具体而言  $\mathbf{x}_i = \mathbf{z}_i - \boldsymbol{\mu}$ ,  $\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{z}_i$ )。

2. 计算  $X$  的协方差矩阵, 用  $\boldsymbol{\Sigma}_{p \times p}$  表示

$$\text{Var} X = \text{Var}(Z - \mathbb{E}Z) = \text{Var} Z = \boldsymbol{\Sigma}$$

实际上  $X$  的协方差矩阵就是原始数据  $Z$  的协方差矩阵。

3. 计算协方差矩阵  $\boldsymbol{\Sigma}$  的特征向量  $\{\boldsymbol{\xi}_j\}$  和特征值  $\{\lambda_j\}$ ,  $j = 1..p$ 。
4. 将特征值从小到大排序。
5. 保留前若干个特征值对应的特征向量, 假设保留的特征值为  $\{\lambda_j^*\}$ ,  $j = 1..q$ , 对应的特征向量构成的矩阵为  $\boldsymbol{\Xi}_{p \times q} = (\boldsymbol{\xi}_1^*, \boldsymbol{\xi}_2^*, \dots, \boldsymbol{\xi}_q^*)$
6. 将数据集  $X$  转换到上述  $q$  个特征向量构建的新的空间中, 得到新的数据集  $\mathbf{X}_{n \times q}^* =$

$$\mathbf{X}\boldsymbol{\Xi} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \dots \\ \mathbf{x}_i \\ \dots \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix} (\boldsymbol{\xi}_1^*, \boldsymbol{\xi}_2^*, \dots, \boldsymbol{\xi}_q^*)$$

## 2.2 主成分分析的数学原理

### 2.2.1 几个重要的定理

**Theorem 2.2.1.**  $\boldsymbol{\Sigma}$  为对称矩阵, 如下优化问题的解  $\mathbf{u}^*$  是  $\boldsymbol{\Sigma}$  的最大特征值对应的特征向量。

$$\mathbf{u}^* = \arg \max_{\|\mathbf{u}\|=1} (\mathbf{u}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{u})$$

证明. 实际上约束条件  $\|\mathbf{u}\| = 1$  等价于  $\mathbf{u}^T \mathbf{u} = 1$

利用拉格朗日乘子法, 得到

$$G(\mathbf{u}; \lambda) = \mathbf{u}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{u} + \lambda(\mathbf{u}^T \mathbf{u} - 1)$$

对  $G$  求  $\mathbf{u}$  的偏导得到

$$\nabla_{\mathbf{u}} G(\mathbf{u}; \lambda) = 2\boldsymbol{\Sigma} \mathbf{u} + 2\lambda \mathbf{u}$$

如果 $\mathbf{u}^*$ 是优化问题的解，那么 $\mathbf{u}^*$ 满足

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{u}} G(\mathbf{u}; \lambda) \big|_{\mathbf{u}=\mathbf{u}^*} &= 0 \\ \Rightarrow \Sigma \mathbf{u}^* &= -\lambda \mathbf{u}^* \\ \Rightarrow \Sigma \mathbf{u}^* &= \lambda^* \mathbf{u}^* \quad (\text{令 } \lambda^* = -\lambda)\end{aligned}$$

所以 $\mathbf{u}^*$ 是矩阵 $\Sigma$ 的特征向量，对应的特征值为 $\lambda^*$ 。

当 $\mathbf{u} = \mathbf{u}^*$ 时，目标函数

$$\mathbf{u}^{*T} \Sigma \mathbf{u}^* = \lambda^* \quad (2.1)$$

为使得公式 (2.1) 最大，必须使得 $\lambda^*$ 最大，即 $\lambda^*$ 等于矩阵 $\Sigma$ 最大的特征值，那么对应的特征向量便是真正的解 $\mathbf{u}^*$ 。

□

## 2.2.2 最大方差投影

用 $\mathbf{u}_{p \times 1}$ 表示某投影方向上的单位向量，那么 $\mathbf{x}_i$ 在 $\mathbf{u}$ 上的投影可以表示为

$$\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{u} \rangle = \mathbf{x}_i^T \mathbf{u}$$

那么数据集 $\mathbf{X}$ 在 $\mathbf{u}$ 上的投影向量为 $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\mathbf{u}$ ，可知 $\mathbf{Y}$ 的均值和方差为

$$\begin{aligned}\mathbb{E} \mathbf{Y} &= \mathbb{E} \mathbf{X} \mathbf{u} \\ \text{Var} \mathbf{Y} &= \text{Var} \mathbf{X} \mathbf{u} = \mathbf{u}^T (\text{Var} \mathbf{X}) \mathbf{u} = \mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u}\end{aligned}$$

主成分分析就是要到一个方向，使得数据集 $\mathbf{X}$ 在该方向上投影方差最大。如果用单位向量 $\mathbf{u}_1$ 来表示这个方向，那么 $\mathbf{u}_1$ 是如下优化问题的解

$$\arg \max_{\|\mathbf{u}\|=1} \mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u}$$

根据定理 2.2.1， $\mathbf{u}_1$ 就是 $\Sigma$ 的最大特征值对应的特征向量，也是第一个主成分的单位向量。

随后要求第二个主成分，用单位向量 $\mathbf{u}_2$ 表示这个方向。根据原理，第二个主成分依然是要最大化投影的方差，但是约束条件要多一个，即 $\mathbf{u}_2$ 与 $\mathbf{u}_1$ 正交。所以 $\mathbf{u}_2$ 是如下优化问题的解

$$\begin{aligned}\arg \max_{\|\mathbf{u}\|=1} \quad & \mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u} \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{u}^T \mathbf{u}_1 = 0\end{aligned}$$

为求解上述优化问题，继续使用拉格朗日乘子法，得到

$$G(\mathbf{u}; \mathbf{u}_1, \lambda, \gamma) = \mathbf{u}^T \Sigma \mathbf{u} + (\mathbf{u}^T \mathbf{u} - 1) + \gamma \mathbf{u}^T \mathbf{u}_1$$

对 $G$ 求 $\mathbf{u}$ 的偏导得到，

$$\nabla_{\mathbf{u}} G(\mathbf{u}; \mathbf{u}_1, \lambda, \gamma) = 2\Sigma \mathbf{u} + 2\lambda \mathbf{u} + \gamma \mathbf{u}_1$$

如果 $\mathbf{u}^*$ 是优化问题的解，那么 $\mathbf{u}^*$ 满足

$$2\Sigma \mathbf{u}^* + 2\lambda \mathbf{u}^* + \gamma \mathbf{u}_1 = 0 \quad (2.2)$$

对公式 (2.2) 两边同乘以 $\mathbf{u}_1^T$ ，得到

$$\begin{aligned} 2\Sigma \mathbf{u}^* \mathbf{u}_1^T + 2\lambda \mathbf{u}^* \mathbf{u}_1^T + \gamma \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1^T &= 0 \\ \Rightarrow \gamma \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1^T &= 0 \quad (\text{因为 } \mathbf{u}_1, \mathbf{u}^* \text{ 正交}) \\ \Rightarrow \gamma &= 0 \quad (\text{因为 } \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1^T = 1) \end{aligned}$$

于是公式 (2.2) 等于

$$\begin{aligned} \Sigma \mathbf{u}^* + \lambda \mathbf{u}^* &= 0 \\ \Rightarrow \Sigma \mathbf{u}^* &= -\lambda \mathbf{u}^* \\ \Rightarrow \Sigma \mathbf{u}^* &= \lambda^* \mathbf{u}^* \quad (\text{令 } \lambda^* = -\lambda) \end{aligned} \quad (2.3)$$

$\mathbf{u}^*$ 也是矩阵 $\Sigma$ 的特征值，与定理 2.2.1 的证明类似，优化问题的目标函数等于 $\lambda^*$ ，为了使目标函数最大，要使 $\lambda^*$ 尽量大，而 $\lambda^*$ 最大可取所有特征值中第二大的，对应的特征向量就是优化问题的解，即**第二主成分**的方向向量。

后面的主成分算法同理类推。

# Chapter 3

## 附录：信息熵

假设<sup>1</sup>  $X$ 是一个取有限值的离散随机变量(本文只考虑离散情况)，概率分布为 $P$ 。

那么 $I(X = x_i) = -\log P(X = x_i)$ 称为事件 $x_i$ 的自信息量，随机变量 $X$ 的熵定义为 $X$ 的自信息量的数学期望，即

$$H(X) = \mathbb{E}(I(X)) = - \sum_x P(x) \log P(x)$$

熵反映的是随机变量不确定程度的大小：熵的值越大，不确定程度越高。

### 3.1 相关概念

#### 3.1.1 条件熵

条件熵是指在联合概率空间上熵的条件自信息的数学期望。在已知 $X$ 时， $Y$ 的条件熵为

$$H(Y|X) = \mathbb{E}_{x,y} I(y_j|x_i) = - \sum_x \sum_y P(x, y) \log P(y|x) \quad (3.1)$$

**Lemma 3.1.1.** 与公式 (3.1)等价的定义为给定 $X$ 条件下 $Y$ 的条件分布概率的熵的数学期望

$$H(Y|X) = \mathbb{E}_x H(Y|X = x) = \sum_x P(x) H(Y|X = x)$$

---

<sup>1</sup>本章参考了信息论与编码(<http://www.docin.com/p-957983839-f6.html>)和信息论基础(<https://wenku.baidu.com/view/5319fed3b9f3f90f76c61b1a.html>)



证明.

$$\begin{aligned}
 H(Y|X) &= - \sum_x \sum_y P(x, y) \log P(y|x) \\
 &= - \sum_x \sum_y P(x) P(y|x) \log P(y|x) \\
 &= - \sum_x P(x) \sum_y P(y|x) \log P(y|x) \quad (P(x) \text{ 与 } y \text{ 无关}) \\
 &= \sum_x P(x) \left[ - \sum_y P(y|x) \log P(y|x) \right] \\
 &= \sum_x P(x) H(Y|X = x)
 \end{aligned}$$

□

$H(Y|X)$  的含义是已知在  $X$  发生的前提下,  $Y$  发生新带来的熵。

### 3.1.2 相对熵

**相对熵**, 也称**KL散度**, 交叉熵等, 定义为两个概率分布之比的数学期望。

设  $Q(x), P(x)$  是随机变量  $X$  中取值的两个概率分布, 则  $P$  对  $Q$  的相对熵是

$$D_{\text{KL}}(P\|Q) = \sum_x P(x) \log \frac{P(x)}{Q(x)} = \mathbb{E}_x \log \frac{P(x)}{Q(x)} \quad (3.2)$$

相对熵可以用来度量两个随机变量的“距离”。

**Lemma 3.1.2.** 相对熵恒大于等于零。

证明. 对于任意分布  $P, Q$ , 根据公式 (3.2), 可知

$$\begin{aligned}
 D_{\text{KL}}(P\|Q) &= \sum_x P(x) \log \frac{P(x)}{Q(x)} \\
 &= - \sum_x P(x) \log \frac{Q(x)}{P(x)} \\
 &\geq - \log \left( \sum_x P(x) \frac{Q(x)}{P(x)} \right) \quad (\text{对 } -\log x \text{ 应用 Jensen 不等式}) \\
 &= - \log \sum_x Q(x) \\
 &= - \log 1 \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

□

### 3.1.3 互信息

两个随机变量 $X, Y$ 的互信息，定义为 $X, Y$ 的联合分布和独立分布乘积的相对熵

$$I(X, Y) = D_{\text{KL}}(P(X, Y) \| P(X)P(Y)) \quad (3.3)$$

**Lemma 3.1.3.** 互信息与条件熵满足如下关系

$$H(X|Y) = H(X) - I(X, Y) \quad (3.4)$$

证明. 根据公式 (3.2) 以及互信息的定义可知

$$I(X, Y) = \sum_{x,y} P(x, y) \log \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)}$$

那么

$$\begin{aligned} H(X) - I(X, Y) &= - \sum_x P(x) \log P(x) - \sum_{x,y} P(x, y) \log \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)} \\ &= - \sum_x \left( \sum_y P(x, y) \right) \log P(x) - \sum_{x,y} P(x, y) \log \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)} \\ &= - \sum_{x,y} P(x, y) \log P(x) - \sum_{x,y} P(x, y) \log \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)} \\ &= - \sum_{x,y} P(x, y) \left( \log P(x) + \log \frac{P(x, y)}{P(x)P(y)} \right) \\ &= - \sum_{x,y} P(x, y) \log \frac{P(x, y)}{P(y)} \\ &= - \sum_{x,y} P(x, y) \log P(x | y) \\ &= H(X|Y) \quad (\text{根据公式 (3.1)}) \end{aligned}$$

□

## 3.2 熵的性质

$X$ 的熵具有如下几个性质

- 非负性： $H(X) \geq 0$ 。<sup>2</sup>
- 对称性：当随机变量的概率取值任意互换时，熵不变。

$$H(p_1, p_2 \dots p_n) = H(p_2, p_1 \dots p_n) = H(p_3, p_1 \dots p_n) = \dots$$

- 可加性：如果随机变量 $X, Y$ 相互独立，则 $H(X, Y) = H(X) + H(Y)$ 。
- 极值性：对于任意概率分布 $P(X = x_i) = p_i$ 和 $P(Y = y_i) = q_i$ ， $i = 1 \dots n$ ，都有

$$H(X) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \leq - \sum_{i=1}^n p_i \log q_i \quad (3.5)$$

当 $X$ 和 $Y$ 的概率分布相同时，公式 (3.5) 取等号。

该性质表明，任意概率分布，它对其他概率分布的自信息取数学期望时，必大于它本身的熵。

- 凸性：对于任意概率分布 $P(X = x_i) = p_i$ 和 $P(Y = y_i) = q_i$ ， $i = 1 \dots n$ ，假设随机变量 $Z$ 的分布为 $P(Z = z_i) = \gamma_i = \alpha p_i + (1 - \alpha) q_i$ ， $\alpha \in [0, 1]$ ，那么 $Z$ 的熵满足

$$H(Z) \geq \alpha H(X) + (1 - \alpha) H(Y) \quad (3.6)$$

**Theorem 3.2.1** (最大熵定理). 离散随机变量 $X$ 的概率分布为 $P(X = x_i) = p_i$ ， $i = 1 \dots n$ ，那么

$$H(X) \leq \log n \quad (3.7)$$

当 $p_1 = p_2 = \dots = \frac{1}{n}$  时，等号成立。

证明. 求熵的最大值等价于以下优化问题

$$\begin{aligned} \max \quad & H(x) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^n p_i = 1 \end{aligned}$$

利用拉格朗日乘子法构造函数

$$G(p, \lambda) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i + \lambda \left( \sum_{i=1}^n p_i - 1 \right) \quad (3.8)$$

---

<sup>2</sup>实际上这种非负性对于离散随机变量 $X$ 成立，对连续随机变量 $X$ 不一定成立。这是本文只考虑离散情况的原因。

公式 (3.8) 中分别对  $p_i$  和  $\lambda$  求导，令其为零，得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(p, \lambda)}{\partial p_i} &= -\log p_i - 1 + \lambda = 0 \\ \sum_{i=1}^n p_i - 1 &= 0 \end{aligned} \tag{3.9}$$

由  $-\log p_i - 1 + \lambda = 0$  可得到  $p_i = e^{\lambda-1}, i = 1, 2..n$ , 由此可知  $p_1 = p_2 = \dots = \frac{1}{n}$

□

**Lemma 3.2.1** (熵的强可加性). 当随机变量  $X, Y$  相关的情况下，联合熵满足强可加性，即

$$\begin{aligned} H(X, Y) &= H(Y) + H(X|Y) \\ H(X, Y) &= H(X) + H(Y|X) \end{aligned} \tag{3.10}$$

证明.

$$\begin{aligned} H(Y) + H(X|Y) &= - \sum_y P(y) \log P(y) - \sum_x \sum_y P(x, y) \log P(x|y) \\ &= - \sum_x \sum_y P(x, y) \log P(y) - \sum_x \sum_y P(x, y) \log P(x|y) \\ &= - \sum_x \sum_y P(x, y) \log P(x, y) \\ &= H(X, Y) \end{aligned}$$

同理可证

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

□

**Lemma 3.2.2** (熵的凸性). 证明公式 (3.6)

证明.

$$\begin{aligned}
 H(Z) &= - \sum_{i=1}^n \gamma_i \log \gamma_i \\
 &= - \sum_{i=1}^n \alpha p_i \log \gamma_i - \sum_{i=1}^n (1-\alpha) q_i \log \gamma_i \\
 &= - \sum_{i=1}^n \alpha p_i \log \left( \gamma_i \frac{p_i}{p_i} \right) - \sum_{i=1}^n (1-\alpha) q_i \log \left( \gamma_i \frac{q_i}{q_i} \right) \\
 &= - \alpha \sum_{i=1}^n p_i \log p_i - (1-\alpha) \sum_{i=1}^n q_i \log q_i - \alpha \sum_{i=1}^n p_i \log \frac{\gamma_i}{p_i} - (1-\alpha) \sum_{i=1}^n q_i \log \frac{\gamma_i}{q_i} \\
 &= \alpha H(X) + (1-\alpha) H(Y) - \alpha \sum_{i=1}^n p_i \log \frac{\gamma_i}{p_i} - (1-\alpha) \sum_{i=1}^n q_i \log \frac{\gamma_i}{q_i}
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

其中公式 (3.11) 的倒数第二项

$$\begin{aligned}
 -\alpha \sum_{i=1}^n p_i \log \frac{\gamma_i}{p_i} &= \alpha \left( - \sum_{i=1}^n p_i \log \gamma_i + \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \right) \\
 &\geq 0 \quad (\text{根据公式 (3.5)})
 \end{aligned}$$

同理可知公式 (3.11) 的倒数第一项

$$-(1-\alpha) \sum_{i=1}^n q_i \log \frac{\gamma_i}{q_i} \geq 0$$

所以得到

$$H(Z) \geq \alpha H(X) + (1-\alpha) H(Y)$$

□

**Theorem 3.2.2.** 条件熵小于无条件熵，即  $H(X|Y) \leq H(X)$

证明.

$$\begin{aligned}
 H(X|Y) - H(X) &= - \sum_{x,y} P(x,y) \log P(x|y) + \sum_x P(x) \log P(x) \\
 &= - \sum_{x,y} P(x,y) \log P(x|y) + \sum_x \left( \sum_y P(x,y) \right) \log P(x) \\
 &= - \sum_{x,y} P(x,y) \log P(x|y) + \sum_{x,y} P(x,y) \log P(x) \\
 &= - \sum_{x,y} P(x,y) (\log P(x|y) - \log P(x)) \\
 &= - \sum_{x,y} P(x,y) \log \frac{P(x,y)}{P(x)P(y)} \\
 &= - \sum_{x,y} P(x,y) \log P(x,y) - \left( - \sum_{x,y} P(x,y) \log P(x)P(y) \right) \\
 &\leq 0 \quad (\text{根据熵的极值性})
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

□

### 3.2.1 整理得到的公式

根据本节内容整理得到的重要公式

- 根据条件熵定义可得

$$H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y) \tag{3.13}$$

- 根据互信息定义展开可得

$$H(X|Y) = H(X) - I(X, Y) \tag{3.14}$$

- 根据公式 (3.13) 和公式 (3.14) 得到的对偶形式

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

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

- 多数文献将下式作为互信息的定义公式

$$I(X, Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y)$$

- $H(X|Y) \leq H(X)$

# 参考文献

Goodfellow, I., Bengio, Y., and Courville, A. (2016). *Deep Learning*. MIT Press. ii

# 索引

Conditional independence, iv  
Covariance, iv  
Derivative, iv  
Determinant, iii  
Element-wise product, *see* Hadamard product  
Graph, iii  
Hadamard product, iii  
Hessian matrix, iv  
Independence, iv  
Integral, iv  
Jacobian matrix, iv  
Kullback-Leibler divergence, iv  
Matrix, ii, iii  
Norm, v  
Scalar, ii, iii  
Set, iii  
Shannon entropy, iv  
Sigmoid, v  
Softplus, v  
Tensor, ii, iii  
Transpose, iii  
Variance, iv  
Vector, ii, iii