标题 **title**

作者 *author*

2024 年 8 月 28 日

前言

目录

第一部分

AI 的逻辑

第一章　合情推理

1983 年，心理学家 Amos Tversky 和 Daniel Kahneman 进行了一个著名的实验，他们向一组被试提出了如下问题：Linda 是一位单身、外向且年龄为 31 岁的女性. 在大学期间，她主修哲学，十分关注种族歧视和社会公正问题，而且曾参加过反核游行. 请给下面几个选项发生的可能性排序，1 代表最可能，8 代表最不可能：

1. Linda 是一个小学老师.
2. Linda 在书店工作，并且参加瑜伽课程.
3. Linda 非常积极参加女权运动.
4. Linda 是一个精神病的护理员.
5. Linda 是美国女性选民联盟的成员.
6. Linda 是一名银行出纳员.
7. Linda 是一个保险销售员.
8. Linda 是一名银行出纳员，同时她还非常积极参加女权运动.

他们对以下三组人进行了同样的实验：(1) 88 名来自斯坦福大学或不列颠哥伦比亚大学（UBC）的本科生，没有学过概率统计，(2) 53 名斯坦福大学的一年级研究生，他们学过一门或更多的概率统计课程，(3) 32 名斯坦福大学商学院博士生，他们学过很多概率统计和决策理论的进阶课程.

我们重点关注第三、六、八个选项. 抽象地来说，我们可以把这三个陈述分别记为 $A, B, A \wedge B$. 从逻辑的角度来看 $A \wedge B$ 发生的时候，A 和 B 都一定发生，因此 A（或 B）更可能发生. 然而，让人大跌眼镜的是，实验结果显示，所有三组人的打分中，超过 85% 的人认为 $A \wedge B$ 更可能发生！

以上现象被称为*合取谬误*，它表明人类的推理并不等同于我们所理解的逻辑推理（被称为*演绎推理*）. 合取谬误的背后隐藏了一种新的推理方式，被称为*合情推理*. 演绎推理很早就有了非常严格的逻辑学框架，得到了充分的研究. 然而，合情推理同样甚至更加重要，它不仅是人类与生俱来的能力，更是科学研究和 AI 的逻辑基础.

本章试图建立合情推理的一个数学模型，这一模型与 Bayes 概率论紧密地联系在一起. 我们会它来研究一些有趣的推理谬误，包括合取谬误，并与演绎推理进行对比. 最后，我们会讨论 Bayes 概率论中先验为什么是存在的.

§1.1 命题逻辑的演绎推理

作为回顾，本节讨论*演绎推理*，它最主要的应用场景是数学证明和一些逻辑论证. 演绎推理定义了数学中一些非常重要的概念，例如“公理”“定理”“证明”. 我们会看到，与演绎推理密切相关的是*形式推理系统*，它尝试将推理的过程抽象为一堆字符串的变换. 作为介绍，我们这里给出*命题逻辑*的形式推理系统，它是最基本的形式推理系统.

*命题*是一种陈述，它可以被判定为真或者假. 例如，“北京是中国的首都. ”是一个命题，而“北京是中国的首都吗? ”是一个疑问句，所以不是命题. 然而，利用自然语言定义命题，很难判断一些奇怪的句子是不是命题：

例 1.1 考虑句子 A：“这句话是假的. ”是一个命题吗？首先，A 是一个陈述句. 那它的真假呢？

- 如果 A 是真的，A 说的是“这句话是假的”，这与 A 真矛盾，所以它不是真的.
- 如果 A 是假的，A 的含义是“这句话是真的”，这与 A 假矛盾，所以它不是假的.

因此，这句话既不是真的也不是假的！ □

以上的现象被称为*自指*，也就是一个东西在描述自己.

自指为讨论命题的概念带来了非常大的麻烦. 为了避免这些麻烦，我们回避命题到底是什么这一哲学问题，而是把他们抽象为一些字符串，这就是*命题公式*：

定义 1.1 (命题公式) **命题公式**（或简称**公式**）是由一些**命题变元**和**连接词**组成的字符串，它们满足以下递归定义：

- 命题变元 $p, q, r, \ldots$ 是命题公式.
- 如果 ϕ 和 ψ 是命题公式，那么 $(\neg\phi)$，$(\phi \vee \psi)$，$(\phi \wedge \psi)$，$(\phi \leftrightarrow \psi)$ 和 $(\phi \to \psi)$ 都是命题公式.

$\neg, \vee, \wedge, \leftrightarrow, \rightarrow$ 被称为连接词，$\neg$ 被称为否定，$\vee$ 被称为析取（或），$\wedge$ 被称为合取（与），$\leftrightarrow$ 被称为双向蕴含（等价），$\rightarrow$ 被称为蕴含（推出）. 在不产生混淆的时候也会省略括号. $A \wedge B$ 也常写作 AB，$\neg A$ 也常写作 $\overline{A}$.

例 1.2 $(p \vee (q \rightarrow r))$ 是命题公式，但是 $p \vee \vee q$ 不是. □

命题最重要的概念是“真假”，因而命题逻辑一个重要的问题是：什么样的公式是真的？给定一个公式集 Γ，对一个公式 ϕ，我们有两种真的概念：

- 语义：$\Gamma \vDash \phi$.
- 语形：$\Gamma \vdash \phi$.

首先看语义. 所谓语义，就是“句子的含义”. 在命题逻辑中，句子就是命题公式，而含义就是真假. 既然命题公式是递归定义的，命题公式的真假我们也应该递归定义.

定义 1.2 (赋值) 给定命题变元集合 V，它形成的命题公式的集合是 L，一个**赋值**是一个从 L 到 $\{\top, \bot\}$ 的映射 v，递归定义如下：

- 如果 $\phi = p \in V$，那么 $v(\phi) = v_p$.
- 如果 $\phi = \neg\psi$，那么 $v(\phi) = \begin{cases} \top, & v(\psi) = \bot, \\ \bot, & v(\psi) = \top. \end{cases}$
- 如果 $\phi = \psi \vee \chi$，那么 $v(\phi) = \begin{cases} \top, & v(\psi) = \top \text{ 或} v(\chi) = \top, \\ \bot, & v(\psi) = \bot \text{ 且} v(\chi) = \bot. \end{cases}$
- 如果 $\phi = \psi \wedge \chi$，那么 $v(\phi) = \begin{cases} \top, & v(\psi) = \top \text{ 且} v(\chi) = \top \\ \bot, & v(\psi) = \bot \text{ 或} v(\chi) = \bot. \end{cases}$
- 如果 $\phi = \psi \rightarrow \chi$，那么 $v(\phi) = \begin{cases} \top, & v(\psi) = \bot \text{ 或} v(\chi) = \top, \\ \bot, & v(\psi) = \top \text{ 且} v(\chi) = \bot. \end{cases}$
- 如果 $\phi = \psi \leftrightarrow \chi$，那么 $v(\phi) = \begin{cases} \top, & v(\psi) = v(\chi) \\ \bot & v(\psi) \neq v(\chi) \end{cases}$

以上定义看起来比较冗长，但是符合我们的直觉. 一种更为直观的表达方式是真值表. 注意，连接词可以被理解为一个真值向量到真值的映射，例如 $\wedge$ 可以被理解为 $\{\top, \bot\}^2 \rightarrow \{\top, \bot\}$ 的映射，这一映射可以用真值表表示：

p	q	$p \wedge q$
$\top$	$\top$	$\top$
$\top$	$\bot$	$\bot$
$\bot$	$\top$	$\bot$
$\bot$	$\bot$	$\bot$

于是，定义中的递归可以用直接用 $\wedge$ 来表示：如果 $\phi = \psi \wedge \chi$，那么 $v(\phi) = v(\psi) \wedge v(\chi)$.

我们看一个例子.

例 1.3 考虑公式 $(p \wedge q) \to r$，我们来定义赋值 v. 首先给命题变元赋值：

	p	q	r
v	$\bot$	$\top$	$\bot$

然后递归计算公式的真值. 首先计算 $(p \wedge q)$ 的真值. 根据真值表，我们有

$$v(p \wedge q) = v(p) \wedge v(q) = \bot \wedge \top = \bot.$$

然后计算 $(p \wedge q) \to r$ 的真值：

$$v((p \wedge q) \to r) = v(p \wedge q) \to v(r) = \bot \to \bot = \top.$$ □

接下来，我们从赋值到推理. 推理是从前提出发，得到结论的过程. 和赋值相关的推理概念有如下定义：

定义 1.3 (语义蕴含) 给定公式集 Γ 和公式 ϕ，如果对任意赋值 v，如果 $v(\psi) = \top$ 对任意 $\psi \in \Gamma$ 都成立，那么 $v(\phi) = \top$，则称 Γ **语义蕴含** ϕ，记作 $\Gamma \vDash \phi$.

换言之，给定一个真的前提 Γ，我们所关注的公式 ϕ 也是真的. 这一概念只关心真值之间的关系，但是至于 Γ 如何导致 ϕ 为真，不是这一概念可以刻画的.

例 1.4 如果 $\Gamma = \{p \to q, q \to r\}$，那么 $\Gamma \vDash p \to r$. 我们来证明这个，对任意赋值 v，如果 $v(p \to q) = \top$，那么 $v(p) = \bot$ 或者 $v(q) = \top$，

- 如果 $v(p) = \bot$，那么 $v(p \to r) = \top$.
- 如果 $v(q) = \top$，那么 $v(q \to r) = v(r)$. 因为 $v(q \to r) = \top$，所以根据定义 $v(r) = \top$，于是 $v(p \to r) = \top$.

不论在何种情况，都有 $v(p \to r) = \top$，即 $\Gamma \vDash p \to r$. □

接下来，我们看语形. 语形就是“句子的形态“，或者说一个句子是如何构造出来的. 它更像我们所理解的“推理”，也就是从一些公式出发，得出另一些公式. *推导规则*描述了从一些公式出发如何得到另外公式. 语法推导的形式是

$$\frac{\phi_1 \quad \phi_2 \quad \cdots \quad \phi_n}{\psi}$$

横线上方的称为*前提*，横线下方的称为*结论*.

在一些命题逻辑的形式推理系统（比如 Hilbert 推理系统）中，推导规则只有一条，即*肯定前件*（MP）：

$$\frac{\phi \to \psi \quad \phi}{\psi}$$

然而，引入更多推导规则可以有助于简化推理的过程，这是另外一些形式推理系统（比如自然演绎系统）的做法. 比如，我们可以加入合取和析取的推导规则：

- 引入新的连接词，例如

$$\frac{\phi \quad \psi}{\phi \wedge \psi}$$

- 消除连接词，例如

$$\frac{\phi \wedge \psi}{\phi}$$

我们再看一个非常重要的例子.

例 1.5 将*归谬法*（RAA）加入推导法则：将 $\neg\phi$ 作为前提，得到了结论 $\bot$，那么可以推出 ϕ 才是结论. 写作

$$\frac{\begin{array}{c}[\neg\phi] \\ \vdots \\ \bot\end{array}}{\phi}$$

方括号表示*假设* $[\neg\phi]$ 是前提，省略号表示推导的中间步骤. 注意，这里是*假设*了一个前提，而不是真的前提，这一点是非常重要的. 利用这一推导规则，我们就可以得到反证法. □

演绎推理所对应的数学模型即为*形式推理系统*：一系列字符串的集合（命题公式），以及一系列的推导规则，以及公理的集合（一些命题公式）.

在形式推理系统中，我们可以形式地定义什么是“推理”和“结论”，而这些东西构成了*演绎推理*的过程与结果：

定义 1.4 (演绎推理) 设 L 是公式集，$A \subseteq L$ 是公理的集合，$\mathcal{R}$ 是推导规则，$\Gamma \subseteq L$，考虑 L 中的序列 $\phi_1, \ldots, \phi_n$，如果对任意 i，ϕ_i 满足下面的其中一个条件：

1. $\phi_i \in A$，
2. $\phi_i \in \Gamma$，或者
3. 存在一个推导规则，和 $\phi_{i_1}, \ldots, \phi_{i_k}$，$i_1, \ldots, i_k < i$ 使得 ϕ_i 可以由 $\phi_{i_1}, \ldots, \phi_{i_k}$ 推导出来，

那么称 $\phi_1, \ldots, \phi_n$ 是从 Γ 出发的一个**演绎推理**，记作 $\Gamma \vdash \phi_n$，ϕ_n 称为**结论**，Γ 称为**前提**.

简而言之，记号 $\Gamma \vdash \phi$ 的意思是以 Γ 作为前提，依据推导法则，通过一系列（但有限）的推理步骤，可以得到 ϕ 作为结论. 因而，语形定义的真值是“可以被推理出来”的概念. 对比语义，语形更加关注“过程”，而不是“关系”.

介绍完了语义和语形，我们现在来看他们之间的关系，其中最重要的是*完备性定理*：

定理 1.1 (完备性定理) *对任意公式集 Γ 和任意公式 ϕ，*

$$\Gamma \vDash \phi \iff \Gamma \vdash \phi.$$

完备性定理有两层意思：能推理出来的都是真的，真的都能被推理出来. 并非所有的形式推理系统都有完备性定理，但是对于命题逻辑来说，这个定理成立的形式推理系统是更加符合直观的.

完备性定理的一个直接推论是，我们可以用真值表来检查从前提出发是否能推出结论. 例如，在例 1.4 中我们验证了 $p \to q, q \to r \vDash p \to r$[1]，所以也有

$$p \to q, q \to r \vdash p \to r,$$

即便我们完全不知道这一推理是如何进行的，我们依然知道这一推理是可行的！

如果 $\varnothing \vDash \phi$，那么称 ϕ 为*重言式*. 重言式是不需要加任何假设也一定成立的公式，是这一推理系统所包含的“正确的废话”. 如果 $\psi \leftrightarrow \phi$ 是重言式，我们就说 ψ, ϕ 是*等值*的. 等值的公式在演绎推理中可以互相替代使用. 例如：$p \to q$ 与 $\neg q \to \neg p$ 是等值的，所以证明一个命题也可以去证明它的逆否命题.

[1]在书写时，我们常常省略 Γ 中的花括号，因此这里写作 $p \to q, q \to r \vDash p \to r$ 而不是 $\{p \to q, q \to r\} \vDash p \to r$. 对于符号 $\vdash$ 我们遵循同样的规则.

§1.2 合情推理的数学模型

现在，我们将话题转到合情推理. 出乎意料的是，人类先天所具备的推理能力，更接近*合情推理*而不是演绎推理. 在婴儿时期，我们需要建立各式各样的经验规则，以便在这个世界生粗下来. 例如，如果婴儿碰到了带电的插座，那么他/她会感受到疼痛，这样就知道了插座是危险的. 下次遇到插座的时候，他/她就会避开插座，因为他/她学到了"所有插座都是危险的"这一经验. 上面的例子都是从一些特殊的事件（摸插座触电了）出发，得到了一些一般的结论（所有插座都是危险的），这就是合情推理的基本形式.

为了从更抽象的角度理解合情推理的形式，我们用经典的*三段论*来对比演绎推理和合情推理.

演绎推理包含两个*强三段论*：

$$\frac{\begin{array}{c}\phi \to \psi \\ \phi \text{ 是真的}\end{array}}{\psi \text{ 是真的}} \qquad \frac{\begin{array}{c}\phi \to \psi \\ \psi \text{ 是假的}\end{array}}{\phi \text{ 是假的}}$$

例如，从科学的角度，触电会疼痛（$\phi \to \psi$），摸插座会触电（ϕ），所以摸插座会疼痛（ψ）. 这是一个演绎推理的例子.

然而，合情推理是完全发过来的，即*弱三段论*，形式上写作

$$\frac{\begin{array}{c}\phi \to \psi \\ \psi \text{ 是真的}\end{array}}{\phi \text{ 变得更合理}}$$

例如，触电会疼痛（$\phi \to \psi$），摸插座会疼痛（ψ），所以摸插座很可能会触电（ϕ）. 这样的推理更符合上面婴儿推理的模式. 虽然我们不能得知 ϕ 的真假，但是根据已有的事实 ψ，我们可以得到 ϕ 的合理性推断. 这样没有严格真假的推理模式就是*合情推理*.

推理的一个重要概念是"真假"，或者说这个推理的正确性、合理性. 在演绎推理中，推理只有两种可能：正确的推理和错误的推理；而在合情推理中，推理的合理性有多种可能，例如"很可能正确""可能正确""很可能错误"等. 我们来看一个例子.

例 1.6 假如婴儿摸了插座，并且感到了疼痛，那么，你觉得他/她会怎么想?

- 选项 1：摸插座是危险的.
- 选项 2：摸的插座上面有微小不可见的细针，细针扎了他/她的手指. □

虽然选项 1 和选项 2 都是可能的，但是他们的合理程度并不同：选项 1 明显比选项 2 要合理得多. 这里产生了一个自然的问题：如何刻画不同推理的合理程度?

§1.2.1 合情推理的基本假设，似然

接下来，我们给合情推理建立一个数学模型. 合情推理的基本方式是给定已知的命题 B，推出命题 A 的*合理程度*，比如“非常可能是真的”“可能是真的”“可能是假的”“非常可能是假的”等，我们用符号 $A|B$ 表示这一合理程度.

在写出符号的时候，我们已经假设了合理程度所对应的数学对象：$A|B$ 应该是 $L \times L \to \mathbb{R}$ 的函数，这里 L 是命题公式的集合. 但是，这一表述是有瑕疵的，因为不是所有的前提到结论的推理都可以用合理程度来描述. 比如，B 是“太阳从西边升起“，前提根本就是一个假命题，从假命题出发，何谈“合情”? 所以，符号 $A|B$ 应该只对一些特定的 A, B 有意义，我们称之为 $L \times L \to \mathbb{R}$ 的*偏函数*，并将这一函数写为 $f(A|B)$，称作*似然*.

我们还没有确定这一映射的具体形式. 但是，这样的映射要满足两个原则：1. 符合我们对于合情推理的基本直观，2. 易于计算.

在这里，我们类比行星运动定律来理解这第二个原则的具体含义. 最开始的时候，人们认为天体都是绕着地球转的. 基于这样的思想，Ptolemaeus 提出了行星运动的模型. 在这个模型中，Ptolemaeus 引入了“均轮”和“本轮”的概念. 行星在一个较小的圆（本轮）上做匀速圆周运动，而这个本轮的中心又在一个更大的圆（均轮）上绕地球做匀速圆周运动. 这一模型可以较为准确预测天体的运动，然而需要非常复杂的概念.

后来，Kepler 提出了完全不同的行星运动模型：行星绕着恒星做椭圆运动，与恒星的连线扫过的面积与运动时间成正比，行星轨道的半长轴的三次方与其公转周期的二次方的比值都相等. 这就是著名的“Kepler 三定律”. 在 Kepler 的模型中，我们放弃了“均轮”和“本轮”的概念，而是用简单的椭圆来描述行星的运动. 尽管 Ptolemaeus 模型和 Kepler 模型都可以描述行星的运动，但是 Kepler 模型更加简单，更加容易计算，也正是在此基础上，Newton 才发现了万有引力定律.

同样的道理也适用于合情推理. 或许会有很多的 f 可以符合直观地描述合理程度，但是我们希望找到一个尽可能容易使用和计算的 f，它能有更广泛的应用，或许也蕴含了更深层次的规律. 现在，我们暂时将所有符合合情推理直观的映射的集合记作 $\mathcal{L}$. 我们给出 $\mathcal{L}$ 中的函数要具备的性质（即假设），然后再确定具体的函数.

首先，在命题逻辑中，我们只关心命题的真假，并不关心命题具体是什么. 在合情推理中，我们依然希望有这样的性质：推理的合理程度不依赖具体的命题形式. 在数学上，这等价于如下的原则：

规则 1.1 (等值原则) *对任意 $f \in \mathcal{L}$，任意命题公式 $\phi_1, \phi_2, \psi \in L$，如果 ϕ_1 和 ϕ_2 等值（即 $\phi_1 \leftrightarrow \phi_2$ 是重言式），那么*

$$f(\phi_1|\psi) = f(\phi_2|\psi).$$

例如，$\phi \to \psi$ 和 $\neg\phi \vee \psi$ 的具体含义是不同的：一个是蕴含式（即 ϕ 推出 ψ），一个是两个命题（$\neg\phi$ 和 ψ）的或；但是他们等值，所以 $f(\phi \to \psi|\xi) = f(\neg\phi \vee \psi|\xi)$. 更多的例子如下：

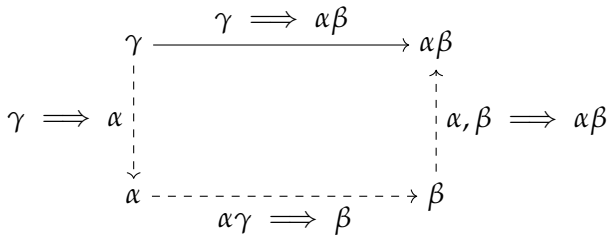
例 1.7 对任意 $f \in \mathcal{L}$ 以及公式 α, β, γ，成立

- $f(\alpha \vee \beta|\gamma) = f((\beta \vee \alpha)|\gamma)$.
- $f((\alpha\beta)\gamma|\delta) = f(\alpha(\beta\gamma)|\delta)$.
- $f(\neg\neg\alpha|\beta) = f(\alpha|\beta)$. □

现在我们来看第二条假设，它与推理不同的路径有关. 考虑从 γ 出发推出 $\alpha\beta$ 为真. 我们有两种推理的链条：

1. 直接推理：直接从 γ 推出 $\alpha\beta$.
2. 分步推理：先从 γ 推出 α，然后从 $\alpha\gamma$ 推出 β，因此自然也推出了 $\alpha\beta$.

也可以用下面的图来直观表示，其中实线箭头表示直接推理，虚线箭头表示分步推理：



我们前面要求，“推理的合理程度不依赖具体的命题形式”，现在，我们将这一要求进一步细化为“推理的合理程度不依赖推理的具体形式”. 因为上面的直接推理和分步推理都是从 γ 推出 $\alpha\beta$，所以我们要求他们的合理程度相同，即

假设 1.1 *对任意 $f \in \mathcal{L}$，存在一个 $\mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 的函数 F，对任意命题公式 α, β, γ，*

$$f(\alpha\beta|\gamma) = F(f(\alpha|\gamma), f(\beta|\alpha\gamma)).$$

换言之，在考虑我们不关心 γ 具体是怎么推出来 α 的，我们只要求 $\alpha\beta$ 的合理程度与 α 和 β 的合理程度有关.

注意，以上假设不能写成 $f(\alpha\beta|\gamma) = F(f(\beta|\gamma), f(\alpha|\gamma))$. 例如，假设 α 是“小明的左眼是蓝色的”，β 是“小明的右眼是棕色的”. $f(\alpha|\gamma)$ 和 $f(\beta|\gamma)$ 都可以很合理，但 $f(\alpha\beta|\gamma)$ 则非常罕见. 同样的道理，我们可以排除其他形式的假设，比如 $f(\alpha\beta|\gamma) = F(f(\gamma|\alpha), f(\beta|\gamma))$.

我们定义的 F 具有如下性质：

定理 1.2 如果 F 是二阶连续可微函数，那么 F 充分必要地满足

$$cf(F(p,q)) = f(p)f(q),$$

这里，c 是某个常数，f 是某个函数. 因此，对任意命题公式 α,β,γ，成立

$$cf(\alpha\beta|\gamma) = f(\alpha|\gamma)f(\beta|\alpha\gamma).$$

回忆，我们的目标是找到一个尽可能简单的 f，它能够描述合情推理的合理程度. 因此，我们可以接受 F 二阶连续可微的假设，然后让 $c = 1$. 于是，我们得到了合情推理的一个基本原则：

规则 1.2 (与规则) 对命题 α,β,γ，成立

$$f(\alpha\beta|\gamma) = f(\alpha|\gamma)f(\beta|\alpha\gamma).$$

第二个考虑的是似然 $f(\alpha|\beta)$ 和 $f(\neg\alpha|\beta)$ 的关系. 两个似然应该存在某种函数关系，于是我们有如下假设：

假设 1.2 对任意 $f \in \mathcal{L}$，存在函数 $S : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$，对任意命题公式 α,β，成立

$$f(\neg\alpha|\beta) = S(f(\alpha|\beta)).$$

在与规则限制之下，我们可以证明 S 具有如下性质：

定理 1.3 如果 S 二阶连续可微，那么 S 充分必要地满足

$$S(x) = (1 - x^m)^{1/m},$$

这里的 m 是一个正常数.

由上面的定理，我们可以得到以下性质

推论 1.1 $f(\alpha|\beta)^m + f(\neg\alpha|\beta)^m = 1.$

证明. $f(\neg\alpha|\beta) = S(f(\alpha|\beta)) = (1 - f(\alpha|\beta)^m)^{1/m}.$ □

同样，从简洁性的角度出发，我们可以接受 S 二阶连续可微的假设，然后让 $m = 1$. 于是，我们得到了合情推理的另一个基本原则：

规则 1.3 (否定规则) 对命题 α,β，成立

$$f(\alpha|\beta) + f(\neg\alpha|\beta) = 1.$$

由上，我们得到了合情推理的三个基本原则：等值原则、与规则和否定规则. 这三个原则构成了合情推理的基本框架.

接下来，我们说明，这三个原则就已经足够用来计算任意的合情推理. 首先，连接词 $\{\wedge, \neg\}$ 组成了演绎逻辑的完备集：所有真值函数都可以用这个集合的词来表示，因此，根据等值规则，只要可以计算包含 $\wedge$ 和 $\neg$ 的合情推理，就可以计算任意合情推理. 其次，我们可以用与规则和否定规则来计算 $\wedge$，否定规则计算 $\neg$，因此，任何命题都可以通过这三个原则来计算.

例 1.8 例如，计算 $f(A \vee B|C)$,

$$\begin{aligned} f(A \vee B|C) &= 1 - f(\overline{A} \wedge \overline{B}|C) \\ &= 1 - f(\overline{A}|C) f(\overline{B}|\overline{A}C) \\ &= 1 - f(\overline{A}|C)(1 - f(B|\overline{A}C)) \\ &= f(A|C) + f(\overline{A}B|C) \\ &= f(A|C) + f(B|C) f(\overline{A}|BC) \\ &= f(A|C) + f(B|C)(1 - f(A|BC)) \\ &= f(A|C) + f(B|C) - f(AB|C). \end{aligned}$$ □

§1.2.2 似然与概率

我们已经知道，似然是一个合理性度量，在本节中，我们将似然与概率联系起来：他们实际上是等价的.

首先介绍 *Kolmogorov* 的概率论，详细的讨论见附录 C. 这一概率论研究事件空间上的概率测度. 其研究对象的总体被称为样本空间，记为 Ω. 我们只能观测到某种可观测的特性 P，而不能直接观测样本点，即我们只能观察事件，或者说集合

$$\{\omega \in \Omega : P(\omega)\}.$$

我们可以观测的所有事件的集合称为事件域，记为 $\mathscr{F}$.

事件域 $\mathscr{F}$ 中的事件之间互相有关联. 我们自然可以观测到 Ω，因此 $\Omega \in \mathscr{F}$. 如果我们可以观测到事件 A，那么我们也可以通过没有观测到 A 来判断观测到了 $\Omega \setminus A$. 因此，$A \in \mathscr{F} \implies \Omega \setminus A \in \mathscr{F}$. 如果我们观测到了 A 或者 B，我们其实也观测到了 $A \cup B$，即 $A, B \in \mathscr{F} \implies A \cup B \in \mathscr{F}$.

事实上，我们可以形式上定义概率：

定义 1.5 (概率) 概率 Pr 是一个事件域 $\mathscr{F}$ 到实数的映射，并且满足：

- 规范性：$\Pr(\Omega) = 1$.
- 非负性：对任意 $A \in \mathscr{F}$，$\Pr(A) \in [0,1]$.
- 可列可加性：对 $A_1, A_2, \ldots$ 满足 $A_i \cap A_j = \varnothing, i \neq j$，有

$$\Pr\left(\bigcup_i A_i\right) = \sum_i \Pr(A_i).$$

事件是命题的集合论描述. 具体来说，有如下对应

事件	命题
Ω	$\top$
$\varnothing$	$\bot$
$A \cap B$	$A \wedge B$
$A \cup B$	$A \vee B$
$A \subseteq B$	$A \to B$
$A = B$	$A \leftrightarrow B$

回忆条件概率的定义，我们可以得到链式法则：

$$\Pr(AB|C) = \frac{\Pr(ABC)}{\Pr(C)} = \frac{\Pr(B|AC)\Pr(AC)}{\Pr(C)} = \Pr(B|AC)\Pr(A|C).$$

回忆补事件公式：$\Pr(A|C) + \Pr(\overline{A}|C) = \Pr(\Omega|C) = 1$. 这两个公式恰好对应了合情推理的与规则以及否定规则！

这并不是巧合，实际上，合情推理与事件域的公理化概率具有一一对应的关系，见表 1.1.

公理化概率论	合情推理
事件	命题
（条件）概率	似然
链式法则	与规则
补事件公式	否定规则

表 1.1: 概率论与合情推理的对应

从这个意义上说，概率是似然唯一的数学模型！从此，我们将似然 $f(A|B)$ 定义为概率 $\Pr(A|B)$.

§1.2.3 先验与基率谬误

在前面，我们有意模糊了条件概率和概率在合情推理中的区别. 然而，这样的区别是非常重要的. 在合情推理中，非条件的概率被称为*先验概率*或者*基率*，它表示了对这个命题合理程度的一种无条件的信念. 对应地，条件概率就是*后验概率*或*似然*，它表示了对合情推理合理程度的一种信念. 先验概率和后验概率有若干相互转化的公式.

条件概率有全概率公式：

定理 1.4 (全概率公式) *设 A_i 是彼此互斥的事件，$\cup_i A_i = \Omega$，那么*

$$\Pr(B) = \sum_i \Pr(B|A_i)\Pr(A_i).$$

全概率公式表明了如何使用似然建立起不同先验概率之间的联系.

条件概率还有 Bayes 定理：

定理 1.5 (Bayes 定理)

$$\Pr(A|B) = \Pr(B|A)\frac{\Pr(A)}{\Pr(B)}.$$

Bayes 定理表明了两个不同的后验概率如何基于先验概率相互转化. 在合情推理中，这表明了前提推结果的强三段论和结果推前提合理性的弱三段论之间的关系.

下面我们看一个合情推理的例子. 一辆出租车在夜间发生了一起肇事逃逸事故. 这座城市有两家出租车公司，绿色和蓝色. 这个城市历史上肇事逃逸车辆 85% 是绿色的，15% 是蓝色的. 一名目击者指认出租车是蓝色的，这里的指认并不一定正确. 考虑一种理想的假设，法庭知道这位证人 80% 的概率能正确识别颜色，20% 的概率会把颜色识别错. 问：事故车辆是那种颜色的可能性更大？忽略先验概率会产生答案是蓝车的结论.

下面我们考虑先验概率再次做计算. 记 B 为肇事逃逸的出租车为蓝色，G 为肇事逃逸的出租车为绿色，R 为目击者指认出租车是蓝色. 先验概率为 $\Pr(B) = 0.15$，$\Pr(G) = 0.85$. 似然为 $\Pr(R|B) = 0.8$, $\Pr(R|G) = 0.2$. 利用全概率公式，$\Pr(R) = \Pr(B)\Pr(R|B) + \Pr(G)\Pr(R|G) = 0.29$.

利用 Bayes 定理，$\Pr(B|R) = \Pr(R|B)\Pr(B)/\Pr(R) \approx 0.41$. 然而，$\Pr(G|R) = \Pr(R|G)\Pr(G)/\Pr(R) \approx 0.59$. 因此我们更应该倾向于认为肇事逃逸的出租车是绿色的！

上面的例子表明人类决策有一种忽略先验概率的倾向，这种倾向被称为*基率谬误*. 为了研究这种谬误，我们将先验概率也纳入合情推理的模型之中. 这样，Kolmogorov 的概率论和合情推理就完全一致了. 反过来说，如果我们将概率论理解为如上合情推理的数学模型，我们就得到了 *Bayes 概率论*.

§1.3 合情推理的归纳强论证

§1.3.1 归纳强论证

在基率谬误的例子中，我们看到合情推理必须要完整地考虑先验的影响. 另一方面，我们看到最终做出决策的方式是*最大似然*，即似然更高的那个命题更有可能是对的. 这说明合情推理中有很不同于演绎推理的论证方式.

我们首先指出合情推理包含了命题逻辑中的两个强三段论：

$$\frac{A \to B \qquad A \text{ 是真的}}{B \text{ 是真的}} \qquad \frac{A \to B \qquad B \text{ 是假的}}{A \text{ 是假的}}$$

我们以第一个三段论为例，记 $C \equiv A \to B$. 由链式法则，$\Pr(B|AC) = \Pr(AB|C) / \Pr(A|C)$. $A \to B$ 意味着作为事件 $A \subseteq B$，即 $AB = A$，$\Pr(AB|C) = \Pr(A|C)$. 代入上式得到 $\Pr(B|AC) = 1$，这就是说，当 A 为真时，B 也为真.

除了演绎逻辑中的强三段论，合情推理还包含了弱三段论的定量形式：

$$\frac{A \to B \qquad B \text{ 是真的}}{A \text{ 变得更合理}}$$

$\Pr(A|C)$ 是 A 的似然，而 $\Pr(A|BC)$ 是假设 B 为真时，A 的似然. 由链式法则，$\Pr(A|BC) = \Pr(A|C) \Pr(B|AC) / \Pr(B|C)$. 因为 $\Pr(B|AC) = 1$ 且 $\Pr(B|C) \leq 1$，所以 $\Pr(A|BC) \geq \Pr(A|C)$. 也就是当 B 为真时，A 的合理程度会变大.

仿照三段论，现在我们将演绎推理中的若干概念推广到合情推理中.

回忆记号 $X \vdash Y$ 表示从前提为 X 出发可以跟据推导规则得到结论 Y. 此时，我们说从 X 到 Y 的过程是一个*有效论证*，或者说 Y 是 X 的*逻辑结论*. 它与以下三个表述等价：

- $X \vDash Y$.
- $X \to Y$ 是重言式.
- $X \wedge \neg Y$ 是矛盾式.

等价性证明由蕴含的推导法则（或演绎定理）和完备性定理得出. 那么，如何在合情推理中定义类似的概念呢？为此，我们引入*随机真值表*.

回忆，事件是命题的集合论描述. 合情推理中，每个事件被赋予一个概率（似然），对应的命题也会被赋予同样的概率. 于是对应于演绎推理中的语义真值表，合情推理中有*随机真值表*，例如

Pr	A	B	$A \vee B$
0.4	$\top$	$\top$	$\top$
0.2	$\top$	$\bot$	$\top$
0.25	$\bot$	$\top$	$\top$
0.15	$\bot$	$\bot$	$\bot$

在合情推理中，我们也有和有效论证对应的*归纳强论证*. 考虑如下推理：

$$\frac{X}{Y}$$

利用随机真值表，我们可以尝试定义*归纳强论证*为 $X \wedge \neg Y$ 的**不太可能**为真（或 $\neg X \vee Y$ **很可能**为真）. 然而我们会看到，仅仅用随机真值表得到的概念是不符合合情推理的直觉的. 我们通过两类例子来引入归纳强论证的限制条件.

例 1.9 (奇怪的例子一) 记 X 为一个北京大学的同学今年 2000 岁，Y 为一个北京大学的同学今年 2000 岁，并且有三条胳膊. 直观来讲，如上 $X \vdash Y$ 不是归纳强论证. 但是，其等效的公式 $\neg X \vee Y$，成立的概率足够大.

考虑另外一个有效论证中的例子. 记 $A_n = \{$圆周率 π 的系数有 n 个连续的 $1\}$. 那么，命题 $A_{n+1} \to A_n$ 看起来是显然的，但与之等值的命题 $\neg A_{n+1} \vee A_n$ 却不太容易被一眼接受. □

这两个例子都说明，判断是否为归纳强论证不能只关注结论成立的概率. 于是，我们得到限制条件：*证据支持*，它的定义如下.

定义 1.6 (证据支持) 假设 X 和 Y 是命题公式，$t \in [0.5, 1]$. 如果 $\Pr(Y|X) > t$，我们称*证据 X 支持 Y 的强度大于 t*.

证据支持是比最大似然准则的更进一步的要求. 然而，证据支持并不能解决所有问题. 考虑下面的例子.

例 1.10 (奇怪的例子二) 记 X 为小明是一位北京大学的学生，Y 为小明不会飞. 表面看来，$\Pr(Y|X) = 1$，但我们知道 $X \vdash Y$ 并不应该是归纳强论证. 问题出在了 $\Pr(Y)$ 本身就等于 1，所以 $\Pr(Y|X) = 1$ 并没有什么实际意义. □

从这个例子出发，我们得到另一个限制条件：*正相关性*，它的定义如下.

定义 1.7 (相关性) 我们称 X 与 Y *正相关*，如果 $\Pr(Y|X) > \Pr(Y)$. 等价地，示性函数 $I(X)$ 和 $I(Y)$ 相关系数大于 0. 类似地，如果 $\Pr(Y|X) < \Pr(Y)$（或 $I(X)$ 和 $I(Y)$ 的相关系数小于 0），那么 X 和 Y *负相关*. 如果 $\Pr(Y|X) = \Pr(Y)$（或 $I(X)$ 和 $I(Y)$ 的相关系数等于 0），那么 X 和 Y *不相关*. 在归纳强论证中，我们要求 X 和 Y 正相关.

加上以上两个限制条件，我们可以得到归纳强论证的严格定义.

定义 1.8 (归纳强论证) 如果论证 $X \Rightarrow Y$ 满足以下三个条件，我们称之为*归纳强论证*：

- X 证据支持 Y：$\Pr(Y|X) > 0.5$.
- X 与 Y 正相关：$\Pr(Y|X) > \Pr(Y)$.
- $X \to Y$ 不是有效论证.

不将有效论证定义为归纳强论证得原因之一是：一个论证可以在前提 X 是矛盾式时有效. 例如：$P \wedge \neg P \vdash Q$ 是有效论证. 但是，由于 $\Pr(P \wedge \neg P) = 0$，$\Pr(Q|P \wedge \neg P)$ 是无定义的，所以 $P \wedge \neg P$ 并不证据支持 Q，也不和 Q 正相关.

进一步，我们还希望能够衡量前提 X 在多大程度上确认结论 Y 成立，我们可以通过如下两个量来衡量：

定义 1.9 (认可度) 考虑命题 X 和 Y. 我们定义*认可概率增量*和*认可度似然比*如下：

- *认可概率增量* $d(X,Y)$：X 发生后给 Y 的发生增加了多大的概率.

$$d(X,Y) = \Pr(Y|X) - \Pr(Y).$$

- *认可度似然比* $\ell(X,Y)$：Y 发生时 X 的似然会比 Y 没发生时 X 的似然增加多少. 该差值越大表示观测到 X 的话越应该发生了 Y. 分母归一化使得 $\ell(X,Y) \in [-1,1]$.

$$\ell(X,Y) = \frac{\Pr(X|Y) - \Pr(X|\neg Y)}{\Pr(X|Y) + \Pr(X|\neg Y)}.$$

这两个认可度的定义其实相互可以转化（见习题[lhy: 出一下]）. 利用这一转化，认可度和相关性的关系可以表达如下：

命题 1.1 *设 $0 < \Pr(X), \Pr(Y) < 1$，下列等价成立：*

- *X 和 Y 正相关* $\iff d(X,Y) > 0 \iff \ell(X,Y) > 0$.
- *X 和 Y 不相关* $\iff d(X,Y) = 0 \iff \ell(X,Y) = 0$.

- X 和 Y 负相关 $\iff d(X,Y)<0 \iff \ell(X,Y)<0$.

认可度与有效论证的关系可以表达如下：

命题 1.2 设 $0<\Pr(X),\Pr(Y)<1$，那么

$$d(X,Y)=\begin{cases}\Pr(\neg Y), & \text{如果} X\vdash Y,\\ -\Pr(Y), & \text{如果} X\vdash \neg Y.\end{cases}$$

$$\ell(X,Y)=\begin{cases}1, & \text{如果} X\vdash Y,\\ -1, & \text{如果} X\vdash \neg Y.\end{cases}$$

§1.3.2 有效论证和归纳强论证的比较

考虑一个论证 $X\Rightarrow Y$，我们已经有三种方式评估 X 如何支持 Y：

1. $X\Rightarrow Y$ 是一个演绎推理：$X\vdash Y$.
2. 基于随机真值表，X 证据支持 Y：$\Pr(Y|X)>0.5$.
3. 基于随机真值表，X 正相关于 Y：$\Pr(Y|X)>\Pr(Y)$.

其中，1 对应有效论证，2 和 3 都是合情推理中的归纳强论证的必要条件. 我们将进一步讨论有效论证和归纳强论证的一些不同之处.

首先，有效论证具有单调性：论证的有效性随着前提的增加不会下降. 即：对于任意 X,Y,Z, 若 $X\vdash Y$, 则 $X,Z\vdash Y$. 然而合情推理中，单调性不再存在. 请看下面的例子.

例 1.11 (非单调性：例子) 考虑命题 X,Y,Z 和对应的随机真值表.

Pr	X	Y	Z	$X\wedge Z$
0.1	$\top$	$\top$	$\top$	$\top$
0.2	$\top$	$\top$	$\bot$	$\bot$
0.2	$\top$	$\bot$	$\top$	$\top$
0	$\top$	$\bot$	$\bot$	$\bot$
0.1	$\bot$	$\top$	$\top$	$\bot$
0.1	$\bot$	$\top$	$\bot$	$\bot$
0.1	$\bot$	$\bot$	$\top$	$\bot$
0.2	$\bot$	$\bot$	$\bot$	$\bot$

$\Pr(Y|X)=(0.1+0.2)/(0.1+0.2+0.2+0)=0.6>0.5$, 然而, $\Pr(Y|X\wedge Z)=(0.1)/(0.1+0.2)=1/3<0.5$. 因此，$X$ 证据支持 Y，但 $X\wedge Z$ 不支持 Y. □

接下来，我们用 Z 论证 Y，将 X 看作某种附加的条件，我们考虑 X 对 Y 这一论据的影响. 在演绎推理中，若 $Z, X \vdash Y$ 和 $Z, \neg X \vdash Y$ 都满足，则 $Z \vdash Y$. 换言之，不论补充论据 X 还是 $\neg X$，从 Z 出发都可以论证出 Y.

如果类比到合情推理中呢? 这就涉及到确凿性原则：如果不论条件在 X 还是 $\neg X$，Z 都是 Y 的一个“好的论据”，那么 Z 就是 Y 的一个“好的论据”. 与之相对应的是无条件确凿性原则：如果 $Z \wedge \neg X$ 和 $Z \wedge X$ 都是 Y 的一个“好的论据”，那么 Z 就是 Y 的一个“好的论据”. “好的论据”可以从证据支持和正相关性两方面考虑.

在任何随机真值表中，如果 $\Pr(Y|Z \wedge X) > 0.5$ 且 $\Pr(Y|Z \wedge \neg X) > 0.5$，那么根据全概率公式，$\Pr(Y|Z) > 0.5$. 因此，从证据支持角度，确凿性原则是成立的. 而同样的论证也说明，从证据支持角度，无条件确凿性原则也是成立的.

在任何随机真值表中，如果 $\Pr(Y|Z \wedge X) > \Pr(Y)$ 且 $\Pr(Y|Z \wedge \neg X) > \Pr(Y)$，那么同样根据全概率公式，$\Pr(Y|Z) > \Pr(Y)$. 因此，从正相关性角度，无条件确凿性原则是成立的. 那么，从正相关性角度，确凿性原则成立吗?

> **注.** 在讨论正相关的时候，无条件确凿性原则和确凿性原则容易被混淆. 在无条件确凿性原则中，我们要求 $Z \wedge X$ 和 $Z \wedge \neg X$ 都是 Y 的好论据，这表现为 $\Pr(Y|Z \wedge X) > \Pr(Y)$ 且 $\Pr(Y|Z \wedge \neg X) > \Pr(Y)$. 而在确凿性原则中，我们要求不论条件在 X 还是 $\neg X$，Z 都是 Y 的好论据. 这一定义其实引入了两个新的概率，即 $Q^+(\cdot) = \Pr(\cdot|X)$ 和 $Q^-(\cdot) = \Pr(\cdot|\neg X)$. 他们的定义为
>
> $$Q^+(\cdot) = \frac{\Pr(\cdot \wedge X)}{\Pr(X)}, \quad Q^-(\cdot) = \frac{\Pr(\cdot \wedge \neg X)}{\Pr(\neg X)}.$$
>
> 于是，确凿性原则中涉及到了三个正相关：在前提中，我们假设了 $Q^+(Y|Z) > Q^+(Y)$ 和 $Q^-(Y|Z) > Q^-(Y)$，而在结论中，我们希望有 $\Pr(Y|Z) > \Pr(Y)$. 这三个正相关的表述其实涉及了三个不同的概率. 第一个正相关表述等价于 $\Pr(Y|Z \wedge X) > \Pr(Y|X)$，第二个正相关表述等价于 $\Pr(Y|Z \wedge \neg X) > \Pr(Y|\neg X)$，因此，他们是完全不同于第三个正相关的.

实际上，并不一定成立！有反直觉的例子：存在 X, Y, Z 和对应的随机真值表，使得

- $\Pr(Y|Z \wedge X) > \Pr(Y|X)$.
- $\Pr(Y|Z \wedge \neg X) > \Pr(Y|\neg X)$.
- 然而，$\Pr(Y|Z) \leq \Pr(Y)$.

这样的现象和 *Simpson* 悖论有关.

举个例子，球员甲的两分球和三分球命中率均高于球员乙，但是球员甲的总投篮命中率却可能低于乙. 具体来说，有一个班中一半同学来自北京大学，另一半来自清华大学，我们抽出一名同学 Bob，估计 Bob 投篮命中的概率. 我们给如下记号：

- 记 Y 为 Bob 投篮命中，记 X 为 Bob 投出一个两分球，则 $\neg X$ 为 Bob 投出一个三分球（我们这里只考虑有两分和三分球）.
- 记 Z 为 Bob 来自清华大学.
- $\Pr(Y)$ 表示全班学生的投篮命中率.
- $\Pr(Y|Z)$ 表示全班来自清华大学的学生的投篮命中率.
- $\Pr(Y|X)$ 表示全班学生的两分命中率.
- $\Pr(Y|\neg X)$ 表示全班学生的三分命中率.
- $\Pr(Y|Z \wedge X)$ 表示这个班来自清华大学的学生的两分命中率.
- $\Pr(Y|Z \wedge \neg X)$ 表示这个班来自清华大学的学生的三分命中率.

考虑这样一个投篮数据的实例：

	全班同学	来自清华大学
两分球	50/100	6/10
三分球	1/101	1/100
总命中率	51/201	7/110

$\Pr(Y) = 51/201$, $\Pr(Y|Z) = 7/110$ 为投篮命中率. $\Pr(Y|X) = 50/100 = 1/2$, $\Pr(Y|Z \wedge X) = 6/10 = 3/5$ 为两分命中率. $\Pr(Y|\neg X) = 1/101$, $\Pr(Y|Z \wedge \neg X) = 1/100$ 为三分命中率. Simpson 悖论在这一实例下表现为：这个班里来自清华大学的学生两分命中率和三分命中率分别都比全班平均水平高，但总体投篮命中率反倒比全班水平低.

我们将这两个概率用全概公式展开来寻找原因：

$$\Pr(Y|Z) = \Pr(Y|Z \wedge X)\Pr(X|Z) + \Pr(Y|Z \wedge \neg X)\Pr(\neg X|Z),$$

$$\Pr(Y) = \Pr(Y|X)\Pr(X) + \Pr(Y|\neg X)\Pr(\neg X).$$

上下两行对应的项，$\Pr > \Pr$. 然而，关键是有可能发生 $\Pr(X|Z) \neq \Pr(X)$. 在上面篮球的例子中表现为清华大学的同学选择投两分球和三分球的比例和全班同学不同. 这表明，Simpson 悖论发生的核心原因与基率谬误类似，即没有正确区分先验概率和后验概率.

接下来我们考虑合取谬误（见本章开头）. 合取谬误是一种认知偏差. 我们这里呈现一个简化的例子作为讨论. Linda 是一位单身、外向且年龄为 31 岁的女性. 在大学期间，她主修哲学，十分关注种族歧视和社会公正问题，而且曾参加过反核游行.（记为 E）请问以下哪一件事情更可能发生?

1. Linda 是一名银行出纳员（记为 B）.

2. Linda 是一名银行出纳员，同时她还积极参加女权运动（记为 $B \wedge F$）.

在调查实验中，多数被试选择了 2. 但是，我们可以肯定 $\Pr(B \wedge F|E) \leq \Pr(B|E)$. 如何理解这一现象?

为了理解这种谬误产生的原因，考虑合取原则：如果 E 是 $P \wedge Q$ 的“好论据”，那么 E 也是 P 的“好论据”，也就是说，如果我可以论证两件事同时成立，那么我也一定可以论证其中一件成立. 在演绎推理中，因为 $E \to (P \wedge Q) \vdash E \to P$，所以合取原则成立.

类似确凿性原则，在合情推理中，合取原则也可以从证据支持和正相关性两方面考虑. 从证据支持的角度，合取原则成立，这是因为，如果 $\Pr(P \wedge Q|E) > 0.5$，那么 $\Pr(P|E) \geq \Pr(P \wedge Q|E) > 0.5$.

然而，从正相关性的角度，合取原则未必成立. 也就是说，假设 $\Pr(P \wedge Q|E) > \Pr(P \wedge Q)$，不一定能推出 $\Pr(P|E) > \Pr(P)$. 当人们给定对 Linda 的描述 E 的时候，很容易建立起 E 和 $B \wedge F$ 的正相关性. 然而这并不意味着 E 和 B 是正相关的！因此发生了合取谬误. 从 Simpson 悖论和合取谬误可以看出，只依靠正相关性进行推理很容易犯错误，因此证据支持（极大似然）是归纳强论证不可缺少的要素.

§1.4 先验模型的存在性

我们现在讨论合情推理的另一个核心：先验的存在性. 事实上，基于先验的推理不仅是 Bayes 概率论的基础，也是人类认知世界的基础. 我们从出生的第一天就在建立和更新自己的先验模型：我们在蹒跚学步的过程中，逐渐理解了对于空间深度的感知（[lhy: 加一下视觉悬崖实验 cite]）；在学习语言的时候，我们通过眼睛观察、耳朵聆听、躯体触碰，不断建立对于物体和动作的概念. 大量发展心理学和认知科学的研究表明，人类通过无数与世界的交互，建立了对于整个世界的先验认知模型.

从更宏观的角度来看，历史上，绝大部分成功的科学理论也都是依赖大量实验与观察数据的. 我们就以家喻户晓的 Newton 万有引力定律为例. 这一定律表明，两个物体之间的引力与他们的质量分别成正比，与他们的距离的平方成反比. 我们总是听到那个美妙的故事，说 Newton 因为被苹果砸到才发现了这一定律. 然而，这个故事忽略了这一定律背后的伟大科学家，Kepler，他总结老师 Tycho 的海量肉眼观测数据，提出了行星运动的三定律. 没有这些定律，Newton 也不可能准确写出平方反比定律.

总的来说，数据驱动产生理论和先验模型的过程在人类个人和整体的发展上都至关重要. 几乎同样的技术和想法被广泛应用在深度学习中，最大的区别是，人类，或者科学

家，被复杂的人工神经网络代替.

不论是人的认知过程、科学理论还是深度学习，数据驱动方式的核心假设是，确实存在一个世界的先验模型，我们通过数据来逼近这个模型. 本节将要给出一个重要的定理，*de Finetti* 定理，它表明在一定合理的条件下，无限多的数据本身一定蕴含了一个先验模型. 因此，数据驱动的模式是合理的，这也成为了 Bayes 概率论的基石之一.

接下来，我们建模这一问题. 首先是数据，观测数据需要遵循可重复性原则. 假如我们观察到了数据 $x_1, x_2, \ldots, x_n$，由于观测有不可控因素，观测结果会有随机性，所以我们假设 $X_1, \ldots, X_n$ 是观测结果 $x_1, \ldots, x_n$ 所对应的随机变量. 从合情推理的角度来说，随机性更像是人对于观测不确定性的一种认识或信念. 所谓的可重复就是指，这些实验不管以什么样的顺序完成，他们都应该产生相同的结果. 假设 π 是一个 $\{1, 2, \ldots, n\}$ 的排列，我们要求

$$(X_1, \ldots, X_n) \overset{d}{=} (X_{\pi(1)}, \ldots, X_{\pi(n)}).$$

也就是说，考虑了随机性之后，打乱观测的顺序，观测结果的概率分布应该是不变的. 随机变量列这样性质的被称可交换性.

那么，什么是理论模型呢？一个定量的理论模型可以看成某种对真实世界的参数化建模，例如参数为 θ，它能够解释 X_i 中的某些规律. 如果我们知道了真实世界的 θ，那么观测结果 X_i 之间不仅仅是可交换的，而且是独立的. 这里的意思是，科学理论所能解释的部分应该使得 X_i 的不确定性不再依赖于其他的 X_j，而仅仅在于一次观测内部. 这样的性质被称为条件独立性.

接下来的问题是，我们是否可以发现一个理论模型？更直接的问题是，如果给我们足够多的数据，我们是否能够直接形成一个对于 θ 的先验信念（即概率密度 p_θ），而不需要再人为有某种特别的先验信念？这就是 de Finetti 定理要回答的问题.

现在我们正式陈述这一定理. 首先，让观测次数为无穷，即 $X_1, X_2, \ldots$. 此时，可交换性指的是任意有限个 $X_{i_1}, X_{i_2}, \ldots, X_{i_n}$ 以及任意一个 $\{i_1, \ldots, i_n\}$ 上的排列 π 都有

$$(X_{i_1}, X_{i_2}, \ldots, X_{i_n}) \overset{d}{=} (X_{\pi(i_1)}, X_{\pi(i_2)}, \ldots, X_{\pi(i_n)}).$$

此时，我们有 de Finetti 定理：

定理 1.6 (de Finetti 定理) *如果 $X_1, X_2, \ldots$ 是可交换的连续型随机变量列，那么存在一个概率密度 p_θ，使得对于任意的 n 和任意的 $x_1, \ldots, x_n$，都有*

$$p_{X_1,\ldots,X_n}(x_1, \ldots, x_n) = \int p_\theta(\theta) \prod_{i=1}^{n} p_{X_i}(x_i|\theta) \mathrm{d}\theta.$$

我们来解释这一定理与上面讨论的对应. 如果我们知道了 θ，那么 $X_1, \ldots, X_n$ 条件在 θ 上的条件密度是 $\prod_{i=1}^{n} p_{X_i}(x_i|\theta)$，因而是条件独立的，这符合了我们对于理论模型的基

本要求. 另外，如果我们不知道 θ，只知道无穷多的观测数据，我们并不需要人为再给定一个关于 θ 的先验，数据本身就已经足够形成先验了，不需要人为的先验.

§1.5 章末注记

[lhy: TODO]

Euclid 在他伟大的《几何原本》[2]最早尝试将数学整理为一个完整的*公理系统*.

§1.6 习题

[lhy: TODO]

[2]实际上，Euclid 的书名直译是“原理”，并没有“几何”一词. 这说明 Euclid 其实在探求某些更加本质的东西，这样的思想后来被发展为了我们今天的*形式推理系统*或*公理系统*.

第二章　Markov 链与决策

我们都知道，人的推理和决策会受到时间的影响：我们宁愿要现在的十块钱也不要十年后的二十块钱. 然而，人和人的耐心程度是不一样的. 2010 年，来自意大利博洛尼亚大学 Manuela Sellitto 和她的同事进行了一项实验. 他们的实验对象是一组大脑正常的人（对照组）、一组非眶额叶区受损的病人（实验组 1）和一组眶额叶周围受损的病人（实验组 2）. 实验人员对被试进行提问，典型的问题如下：“你想要现在拿到 10 美元还是一个月后拿到 12 美元?”. 他们对食物和货币形式的奖励都进行了测试.

结果显示，眶额叶周围受损的病人更倾向于选择即时的奖励，而其他组的人更倾向于选择未来的奖励. 如果货币奖励翻倍（例如，从 50 美元变为 100 美元），对照组和实验组 1 的人愿意等待 4 到 6 个月，而眶额叶周围受损的人（实验组 2）甚至不愿意等待 3 周. 换句话说，人的耐心程度是大脑结构决定的，而不是自己可以轻易改变的！

以上例子不仅说明时间在决策中的重要性，更说明人脑中有特殊的结构和机制处理时间相关的决策问题. 这样的观察对于人工智能也是同样重要的. 本章我们将介绍 Markov 链，这是一种带有时间的概率模型，它是应用最为成功的含时决策模型之一. 我们还将介绍人工智能领域基于 Markov 链的各种应用，包括 Markov 决策模型与强化学习、隐 Markov 模型以及扩散模型.

§2.1　Markov 链

在第一章中，我们说明了合情推理是人和 AI 非常重要的推理方式，这一推理模式基于 Bayes 概率论和似然. 然而，这一模型对推理的假设是逻辑的、静态的，时间的概念并不出现在似然里面. 例如，考虑一个罐子，里面有除颜色之外不可区分的 N 个球，有 n 个白球，剩下的是黑球. 顺序从中拿出 N 个球，第 k 次拿出的球颜色是 W_k 或 B_k.

用 Bayes 定理很容易证明，对任意 $i \neq j$，$\Pr(W_i|W_j) = \Pr(W_j|W_i)$. 也就是说，$\Pr(W_i|W_j)$ 和 $\Pr(W_j|W_i)$ 不仅是可计算的，而且是相等的. 然而，如果从推理的角度来说，我们基于时间更晚的状态推理时间更早的状态，这样的推理需要我们能够有对未来

的模型. 因此，我们需要引入一个带有时间的推理模型，这就是 Markov 链.

定义 2.1 (Markov 链) **Markov 链**（**马氏链**）是一个随机变量序列 $\{X_t\}_{t=0}^{\infty}$. 包含如下概念：

- *状态空间* $\mathcal{S}$：X_t 所有可能值构成的集合，有限或者可数.
- *转移矩阵* $\mathcal{P}$（*转移核*）：下一时刻系统状态之间转移的概率. $\mathcal{P} = (p_{ij})_{i,j\in\mathcal{S}}$，$p_{ij}$ 是从 i 状态转移到 j 状态的概率.
- *Markov 性*: 对任意时刻 $t = 1, \ldots, n$ 和任意状态 $j, k, j_0, \ldots, j_{t-1} \in \mathcal{S}$，如下等式成立

$$\Pr(X_{t+1} = j | X_t = k, X_{t-1} = j_{t-1}, \ldots, X_0 = j_0) = \Pr(X_{t+1} = j | X_t = k) = p_{kj}.$$

有时候也会考虑带初态的 Markov 链，此时 X_0 服从分布 $\lambda = (\lambda_s)_{s\in\mathcal{S}}$.

我们给出的定义是简化的 Markov 链，每个时刻之间的转移都是一样的转移矩阵，这样的 Markov 链被称为*时齐的*. 有时候也会考虑非时齐的 Markov 链（例如扩散模型），即每个时刻之间的转移矩阵不一样，这样的 Markov 链被称为*非时齐的*，此时 t 时刻的转移矩阵是 $\mathcal{P}^{(t)}$，定义中 Markov 性的转移概率是 $p_{kj}^{(t)}$.

Markov 链是一种简化的带时间的概率模型，它最重要的性质是 Markov 性，即在固定现在的情况下，过去与未来相互独立. 这一性质的数学表述为：

命题 2.1 (Markov 性) *条件在 $X_n = i$ 下，$\{Y_m\}_{m=0}^{\infty} := \{X_{m+n}\}_{m=0}^{\infty}$ 是一个转移矩阵为 P 的 Markov 链，并且与 $(X_0, \ldots, X_{n-1})$ 相互独立.*

证明留做习题.

我们考虑的 Markov 链还有时齐性，即状态的转移不依赖当前时间，只和当前的状态有关. 时齐性的数学表述为：

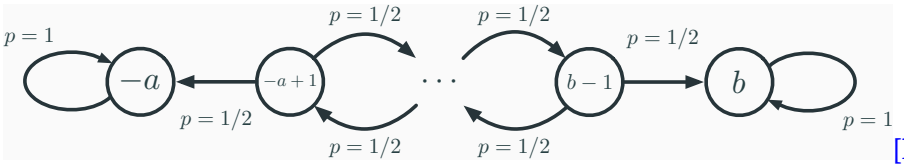
命题 2.2 *设 $\{X_t\}_{t=0}^{\infty}$ 是一个 Markov 链，那么对任意的 $t, m, n \in \mathbb{N}$ 和 $i, j, k \in \mathcal{S}$，有* $\Pr(X_{m+n} = j | X_n = k) = \Pr(X_m = j | X_0 = k)$.

我们来看一个 Markov 链的例子.

例 2.1 (赌徒模型) 考虑公平对赌. 玩家 A 和 B 抛硬币来赌钱，A 赌正面，B 赌反面. 每一轮独立地抛硬币，正面朝上的概率和反面朝上的概率相等，都是 $1/2$. 赢的一方给输的一方一块钱. A 输 a 块钱破产，B 输 b 块钱破产，Z_i 是第 i 轮 A 的收入. $Z_0 = X_0 = 0$ 是 A 初始的收入. $X_n = Z_0 + \cdots + Z_n$ 是 A 的累计收入. 那么，$\{X_n\}_{n\geq 0}$ 是一个 Markov 链.

- 状态空间：$\mathcal{S} = \{-a, -a+1, \ldots, 0, 1, \ldots, b\}$.
- 转移概率：对 $-a < i < b-1$，$p_{i,i+1} = p_{i+1,i} = 1/2$；$p_{-a+1,-a} = p_{b-1,b} = 1/2$，$p_{-a,-a} = p_{b,b} = 1$；其他值为 0. □

转移矩阵可以画成图 2.1所示的形式.



[lhy: TODO：改图]

图 2.1: 赌徒模型的转移矩阵

接下来，我们来看一个非时齐的 Markov 链的例子.

例 2.2 (Pólya 的坛子) 想象现在有一个坛子. 开始的时候，坛子里有 1 个白球和 1 个黑球. 每一轮，我们从坛子里拿出一个球，观察颜色，然后放回去，再加入一个和刚才拿出的球颜色相同的球. 例如，如果第一轮我们拿出一个白球，那么第二轮开始时坛子里有 2 个白球和 1 个黑球.

设 X_t 是第 t 轮之后白球的数量，我们会发现，它是一个非时齐的 Markov 链，转移概率为

- $\Pr(X_{t+1} = i+1 | X_t = i) = i/(t+2)$,
- $\Pr(X_{t+1} = i | X_t = i) = (t+1-i)/(t+2)$,
- 其他值的概率为 0.

这个 Markov 链的一个重要性质是当 $t \to \infty$ 时，X_t/t 趋于均匀分布 $\mathcal{U}[0,1]$.

这个性质可以通过对 t 进行归纳证明，即 X_t 是 $\{1, \ldots, t+1\}$ 上的均匀分布. $t = 0$ 时，$X_0 = 1$，显然成立. 假设对 t 成立，即 X_t 是 $\{1, \ldots, t+1\}$ 上的均匀分布. 那么对 $t+1$ 以及 $1 \le j \le t+2$，根据全概率公式，我们有

$$\begin{aligned}
\Pr(X_{t+1} = j) &= \sum_{k=1}^{t+1} \Pr(X_{t+1} = j | X_t = k) \Pr(X_t = k) \\
&= \frac{1}{t+1} (\Pr(X_{t+1} = j | X_t = j-1) + \Pr(X_{t+1} = j | X_t = j)) \\
&= \frac{1}{t+1} \left(\frac{j-1}{t+2} + \frac{t+2-j}{t+2} \right) = \frac{1}{t+2}.
\end{aligned}$$

于是，归纳成立.

Pólya 的坛子还有一种有趣的解读：如果我们把人生的每一次选择都看成放球，我们经常会基于现在好的东西（看到的黑球还是白球）投资自己的人生（放一个黑球还是白球），这样的结果是我们的人生会多姿多彩，百花齐放. □

我们回到赌徒模型. A 的累计收入 $\{X_n\}_{n\geq 0}$ 形成了 Markov 链. 根据 Markov 性，未来双方的收入变化只取决于现在，而和过去运气无关. 与之相关的一个现象是赌徒谬误，即认为过去的运气会影响未来的运气. 例如，如果一个人连续输了很多次，那么他会认为自己未来运气会变好，赢的概率更大. 但是，根据 Markov 性，过去的运气不会影响未来的运气，因此这种想法是错误的. “风水轮流转” 在一场公平对赌中是不正确的认知. 那么，如何评估赌局的公平性？

如果对赌是公平的，那么我们应该认为两个人每一轮的累计收入分布都是一样的，即

$$\Pr(X_n = i | X_0 = 0) = \Pr(X_n = -i | X_0 = 0).$$

因此，我们需要能够计算多步转移的概率. 设 $p_{ij}^{(k)}$ 表示从状态 i 用 k 步转移到状态 j 的概率. k 步转移概率形成了一个矩阵 $\mathcal{P}^{(k)}$. 下面的定理给出了计算*多步转移概率*的方法.

定理 2.1 (Kolmogorov-Chapman 方程) $P^{(k+l)} = \mathcal{P}^{(k)}\mathcal{P}^{(l)}$.

证明. 由 Markov 性、时齐性和全概率公式，

$$\begin{aligned} p_{ij}^{(k+l)} &= \Pr(X_{k+l} = j | X_0 = i) \\ &= \sum_{\alpha} \Pr(X_{k+l} = j, X_k = \alpha | X_0 = i) \\ &= \sum_{\alpha} \Pr(X_k = \alpha | X_0 = i) \Pr(X_{k+l} = j | X_k = \alpha) \\ &= \sum_{\alpha} p_{i\alpha}^{(k)} p_{\alpha j}^{(l)}. \end{aligned}$$

□

Kolmogorov-Chapman 方程有两个重要的特例，前向方程：$\mathcal{P}^{(k+1)} = \mathcal{P}^{(k)}\mathcal{P}$，以及后向方程：$\mathcal{P}^{(l+1)} = \mathcal{P}\mathcal{P}^{(l)}$. 见图 2.2 和图 2.3.

此外，利用归纳法，我们还有如下推论：

推论 2.1 $\mathcal{P}^{(k)} = \mathcal{P}^k$.

若已知初始分布向量为 λ，利用这一推论，我们可以计算它随时间的演化：

$$\lambda^{\mathsf{T}}, \lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}, \ldots, \lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}^n, \ldots$$

[lhy: TODO: 重 画]

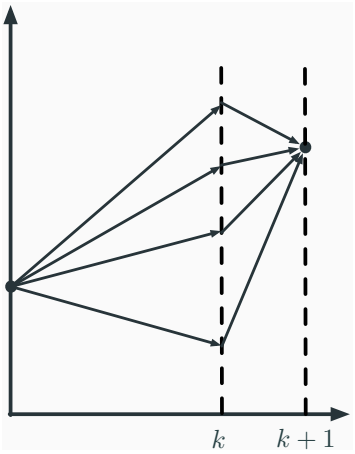


图 2.2: 前向方程（往前一步）

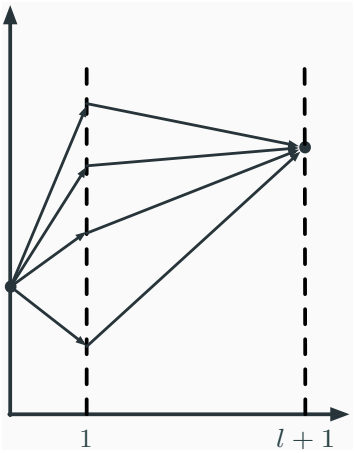


图 2.3: 后向方程（往回一步）

回到赌徒模型，如何计算公平对赌中 X_n 的概率分布？我们先来看一个简化的例子. 考虑只有两个状态 0,1，转移矩阵为

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \end{pmatrix}.$$

或者画成图 2.4 的形式.

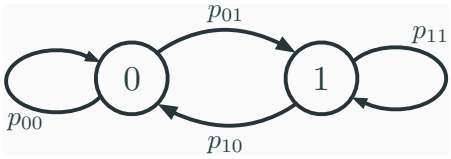


图 2.4: 只有两个状态的 Markov 链

可以归纳证明：

$$\begin{aligned}\mathcal{P}^n =& \frac{1}{2-p_{00}-p_{11}}\begin{pmatrix}1-p_{11} & 1-p_{00}\\ 1-p_{11} & 1-p_{00}\end{pmatrix}\\ &+\frac{(p_{00}+p_{11}-1)^n}{2-p_{00}-p_{11}}\begin{pmatrix}1-p_{00} & -(1-p_{00})\\ -(1-p_{11}) & 1-p_{11}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

假设 $|p_{00}+p_{11}-1|<1$，等价地，p_{00} 和 p_{11} 不同时为 0 或同时为 1，那么

- $\lim_{n\to\infty} p_{i0}^{(n)} = (1-p_{11})/(2-p_{00}-p_{11})$，
- $\lim_{n\to\infty} p_{i1}^{(n)} = (1-p_{00})/(2-p_{00}-p_{11})$.

因此，无论初始分布是什么，随着时间的推移，Markov 链的分布会收敛到一个同一个稳定的分布. 这个例子是否具有普遍性?

我们再考虑一个例子. 一个六元环 $\mathbb{Z}_6=\{0,1,2,3,4,5\}$ 上的 Markov 链 X_k，转移矩阵为 $p(i,i+1)=p(i,i-1)=1/2$，这里的表达式将 -1 和 5 等同，6 和 0 等同. 如果初始分布集中在 0 上，那么我们会发现以概率 1 有 $X_{2k}\in\{0,2,4\}$，$X_{2k+1}\in\{1,3,5\}$. 这种情况下，最终不会趋于一个稳定的分布！如果初始分布等概率地分布在 $\{0,1\}$ 上，最终会趋于一个 $\mathbb{Z}_6$ 上的均匀分布. 因此，并不是所有 Markov 链都具有这样的性质. 然而，对于相当广泛的一类 Markov 链，这一结论成立，这就是*遍历定理*.

定理 2.2 (遍历定理) *设 Markov 链的状态空间为 $\mathcal{S}=\{1,\dots,N\}$，转移矩阵为 $\mathcal{P}=(p_{ij})$. 如果对于某一个 n_0 有*

$$\min_{ij} p_{ij}^{(n_0)} > 0, \tag{2.1}$$

那么存在分布 $\lambda=(\lambda_1,\dots,\lambda_N)$ 使得

$$\lambda_i>0,\quad \sum_i \lambda_i = 1, \tag{2.2}$$

并且对于每一个 $j\in\mathcal{S}$ 和任意 $i\in\mathcal{S}$ 都有

$$p_{ij}^{(n)} \to \lambda_j, n\to\infty. \tag{2.3}$$

反之，如果存在满足 (2.2) 和 (2.3) 的 λ，则存在满足 (2.1) 的 n_0.

最后，在以上条件下，(2.2) 的 λ 满足

$$\lambda^{\mathsf{T}} = \lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}. \tag{2.4}$$

条件 (2.1) 表明超过某个步数 n_0 之后，从 i 出发到达 j 的概率总是正的，这个条件被称为*遍历*. 条件 (2.2) 表明每一个状态被访问到的概率都是正的，没有 “死状态”. 遍历定理表明遍历的 Markov 链从任何状态出发都是不可逆的，最终会把每个状态都走过一遍（遍历），变成一个混合均匀的状态. 这可以用来解释物理学中的扩散现象，也是扩散模型的基础.

下面我们证明遍历定理.

证明. 首先证明从 (2.1) 到 (2.2) 和 (2.3) 的过程. 定义序列

$$m_j^{(n)} = \min_i p_{ij}^{(n)}, \quad M_j^{(n)} = \max_i p_{ij}^{(n)}.$$

我们先证明这两个序列是单调的. 由于

$$p_{ij}^{(n+1)} = \sum_\alpha p_{i\alpha} p_{\alpha j}^{(n)},$$

可见

$$m_j^{(n+1)} = \min_i p_{ij}^{(n+1)} \geq \min_i \sum_\alpha p_{i\alpha} \min_\alpha p_{\alpha j}^{(n)} = m_j^{(n)},$$

因此 $m_j^{(n)} \leq m_j^{(n+1)}$.

类似地 $M_j^{(n)} \geq M_j^{(n+1)}$.

接下来我们说明，$M_j^{(n)} - m_j^{(n)}$ 会趋于零. 设 $\varepsilon = \min_{i,j} p_{ij}^{(n_0)} > 0$，由 Kolmogorov-Chapman 方程可得

$$\begin{aligned} p_{ij}^{(n_0+n)} &= \sum_\alpha p_{i\alpha}^{(n_0)} p_{\alpha j}^{(n)} = \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] p_{\alpha j}^{(n)} + \varepsilon \sum_\alpha p_{j\alpha}^{(n)} p_{\alpha j}^{(n)} \\ &= \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] p_{\alpha j}^{(n)} + \varepsilon p_{jj}^{(2n)} \end{aligned}$$

而由于 $p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \geq p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon \geq 0$，可见

$$p_{ij}^{(n_0+n)} \geq m_j^{(n)} \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] + \varepsilon p_{jj}^{(2n)} = m_j^{(n)}(1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)},$$

最后一个等式是因为概率求和为 1. 由 i 的任意性，左边的不等式对所有 i 都成立，所以对最小的也成立：

$$m_j^{(n_0+n)} \geq m_j^{(n)}(1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)}.$$

同理，考虑 $M_j^{(n)}$，有

$$p_{ij}^{(n_0+n)} \leq M_j^{(n)} \sum_\alpha \left[p_{i\alpha}^{(n_0)} - \varepsilon p_{j\alpha}^{(n)} \right] + \varepsilon p_{jj}^{(2n)} = M_j^{(n)} (1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)},$$

类似可得

$$M_j^{(n_0+n)} \leq M_j^{(n)} (1-\varepsilon) + \varepsilon p_{jj}^{(2n)}.$$

从而

$$M_j^{(n_0+n)} - m_j^{(n_0+n)} \leq \left(M_j^{(n)} - m_j^{(n)} \right) (1-\varepsilon),$$

说明当 $n \to \infty$，$M_j^{(n)} - m_j^{(n)} \to 0$，$M^{(n)}$ 和 $m^{(n)}$ 趋于同一个极限.

若记 $\pi_j = \lim_n m_j^{(n)}$，则

$$\left| p_{ij}^{(n)} - \pi_j \right| \leq M_j^{(n)} - m_j^{(n)} \leq (1-\varepsilon)^{[n/n_0]-1},$$

即 $p_{ij}^{(n)}$ 以几何速度收敛于极限值 π_j.

因为 $m_j^{(n)} \geqslant m_j^{(n_0)} \geqslant \varepsilon > 0, n \geqslant n_0$，所以 $\pi_j > 0$. 这就推出了 (2.2) 和 (2.3).

接下来，我们说明 (2.2) 和 (2.3) 可以推出 (2.1). 因为状态数有限，所以对任意充分小的 $\varepsilon > 0$，存在 n_0 使得对任意 i, j，

$$\left| p_{ij}^{(n)} - \pi_j \right| \leq \varepsilon, n \geq n_0.$$

因此

$$p_{ij}^{(n)} \geq \pi_j - \varepsilon > 0, n \geq n_0.$$

最后我们说明 (2.3) 可以推出 (2.4). 注意到

$$\lim_{n\to\infty} \lambda^{\mathsf{T}} \mathcal{P}^n = \left(\sum_i \lambda_i \pi_1, \sum_i \lambda_i \pi_2, \ldots, \sum_i \lambda_i \pi_N \right) = \lambda^{\mathsf{T}}.$$

等式两边同时右乘 $\mathcal{P}$，左边的极限不变，右边变成 $\lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P}$，所以 $\lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P} = \lambda^{\mathsf{T}}$. □

满足条件 (2.4) 的分布被称为平稳分布. 用性质 $\lambda^{\mathsf{T}}\mathcal{P} = \lambda^{\mathsf{T}}$ 很容易说明，平稳分布为初始状态时，Markov 链的演化与时间无关：

命题 2.3 *设 $\{X_n\}$ 是 Markov 链，如果 X_0 是平稳分布，那么 $(X_k, \ldots, X_{k+l})$ 的联合分布不依赖于 k.*

如果 Markov 链是遍历的，那么平稳分布是唯一的：

命题 2.4 *设 $\{X_n\}$ 是遍历的 Markov 链，那么它有唯一平稳分布 μ.*

证明. 假设 μ 是另外一个平稳分布，那么 $\mu_j = \sum_\alpha \mu_\alpha p_{\alpha j} = \cdots = \sum_\alpha \mu_\alpha p_{\alpha j}^{(n)}$. 因为 $p_{\alpha j}^{(n)} \to \lambda_j$，所以 $\mu_j = \sum_\alpha (\mu_\alpha \lambda_j) = \lambda_j$. □

非遍历 Markov 链也可能存在（唯一）平稳分布，考虑如下转移矩阵：

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

它有唯一平稳分布 $\lambda = (1/2, 1/2)^\mathsf{T}$.

§2.2 Markov 奖励过程（MRP）

我们接下来的目标就是在 Markov 链上建立决策理论. 很多认知科学的研究证明，人和动物在做决策的时候，脑中会有一个*价值系统*，用来评估每一个行动的可能产生的价值/奖励. 俗话说，最美味的食物是饿了一整天之后的白米饭；然而，如果我们每一顿饭都是山珍海味，就算是龙虾也会变得索然无味. 这说明，我们的价值系统会随着时间和自身的状态而发生改变. 另一方面，本章开篇所讲的故事表明，我们的价值系统会对不同时期的奖励产生不同的反应，一般来说，我们会对即时奖励更加敏感.

总结上面的观察，我们可以在 Markov 链上引入类似的价值系统，这就是 Markov 奖励过程（MRP）. 在进入正式定义之前，我们先来看一个例子.

例 2.3 (李二的 MRP) 在一个学期中，学生李二可能处于几种状态：在教室 1 中、刷手机、在教室 2 中、约会、睡觉、考试通过、考试挂科.

学生在不同的状态下会有不同的奖励，例如，李二总是进入教室 1 逼迫自己学习，因为不情愿，所以奖励是 -2；但如果他被某个姑娘邀请去约会，他会很激动，所以奖励是 $+5$.

当处于某个状态时，李二会有一定的概率转移到另一个状态. 例如，在教室 1 中，因为李二并不情愿学习，所以他会有 0.5 的概率开始刷手机，还有另外 0.5 的概率，他发现差不多该去上课了，于是进入了教室 2. 简化起见，在状态转移中，我们考虑抽象的时间单位，对于李二来说，时刻只会有 $t = 0, 1, 2, \ldots$

李二的人生就在这些状态之间循环往复，当他进入某个状态之后，他就会获得相应的奖励. 这个过程可以被图 2.5 描述. [lhy: 重画]

李二除了会获得即时奖励，他还会对未来有预期. 例如，尽管李二不愿意学习，但是考试通过的奖励是 $+10$，为了这么大的奖励，现在遭罪一些是值得的，所以他会愿意坐在教室 1 里自习. 假如下一刻李二就要考试，这一刻他开始在教室 1 中自习，他对于下一

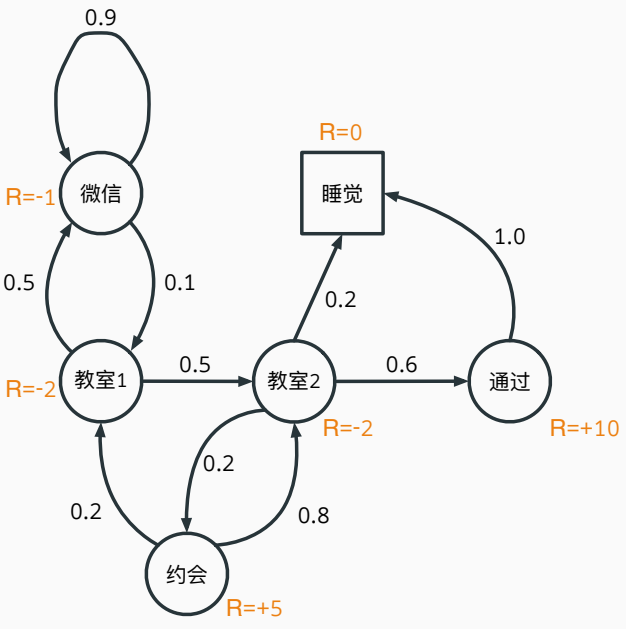


图 2.5: 学生 MRP

刻考试通过的奖励预期是 $+9$. 也就是说，李二对未来的奖励会有一个折扣，这个折扣系数就是 $\gamma = 9/10 = 0.9$. □

更一般地，我们可以形式上定义 MRP.

定义 2.2 (Markov 奖励过程，MRP) 一个 **Markov 奖励过程**（**Markov 奖励模型**，**MRP**）由四元组 $\langle \mathcal{S}, \mathcal{P}, \mathcal{R}, \gamma \rangle$ 构成：

- $\mathcal{S}$ 是一个有穷的状态集合.
- $\mathcal{P}$ 是一个状态转移矩阵，从 i 转移到 j 的概率记为 $\mathcal{P}_{i,j}$. 根据这一转移矩阵可以产生一个状态转移的 Markov 链 $\{S_t\}_{t \geq 0}$.
- $\mathcal{R}$ 是（单步期望）奖励函数，定义为 $\mathcal{R}_s = \mathbb{E}[R_{t+1} | S_t = s]$，其中，随机变量 R_{t+1} 表示下一阶段所处状态的奖励. 也就是说，当 t 时刻位于状态 s 时，$\mathcal{R}_s$ 是下一时刻获得的奖励的期望.
- γ 是一个折扣系数，$\gamma \in [0, 1]$.

在 MRP 中，我们最关心的并不是实时奖励，而是综合来看整个过程的奖励. 为了描述这一点，我们引入回报的概念.

定义 2.3 (回报) MRP 中，t 时刻以后的总**回报**G_t 定义为

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}.$$

从定义中可以看到，$\gamma \in [0,1]$ 衡量了未来下一时段单位奖励在当前时刻的价值，γ 越小，我们更偏好即时奖励，因而更“短视”；γ 越大，我们更偏好未来奖励，因而更有“远见”.

我们这里对折扣做了极大的简化. 折扣系数和时间、状态都有可能有依赖关系.

- 在李二的例子中，他可能更愿意十天后有一次约会，而不是通过考试，换言之，约会对他的折扣系数可能是 0.99，而考试通过的折扣系数可能是 0.9.
- 如果老师给李二布置的作业难度波动很大，那么李二做完作业之后对通过考试的折扣系数就会发生变化：作业简单，李二觉得自己已经掌握了知识，对通过考试的折扣系数就会降低；作业困难，李二觉得自己可能很难通过考试，对通过考试的折扣系数就会提高.

然而，在 MRP 的定义中，我们假设了一个固定的折扣系数，并且规定了一个简单的方法计算折扣：t 时刻后的奖励是即时奖励的 γ^t 倍. 这一定义体现了折衷的思想：如果折扣系数太符合实际，那么这个模型就不太实用. 在我们的定义之下，随着时间改变，折扣系数会指数衰减，这不仅和实验结果比较符合，而且也使得 Markov 性能被很好利用.

除了回报之外，在 MRP 中，我们更关心的是*价值函数*，即处于某个状态时候预期的回报是多少：

定义 2.4 (价值函数) 在 MRP 中，**状态-价值函数**（或**价值函数**）定义为

$$v(s) = \mathbb{E}[G_t | S_t = s].$$

注意，等式右边有 t 但左边没有，所以我们需要说明这个定义对任意 t 都是成立的. 我们只需要说明对于任意的 t，$t+1$ 和 t 定义了同一个 $v(s)$. 注意，随机变量 R_{t+k} 只依赖于 S_{t+k}，即 $R_{t+k} = R(S_{t+k})$，所以

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[G_t | S_t = s] &= \mathbb{E}\left[\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1} \middle| S_t = s\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R(S_{t+k+1}) \middle| S_t = s\right] \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k \mathbb{E}[R(S_{t+k+1}) | S_t = s].
\end{aligned}$$

注意，项 $\mathbb{E}[R(S_{t+k+1})|S_t = s]$ 的定义满足 Markov 性，即

$$\mathbb{E}[R(S_{t+k+1})|S_t = s] = \mathbb{E}[R(S_{t+k+2})|S_{t+1} = s].$$

因而对于任意的 t，$t+1$ 和 t 定义了同一个 $v(s)$.

因此，这一定义蕴含了 Markov 性：只从当前起考虑未来收益，不考虑历史收益（沉没成本）的影响；也蕴含了时齐性：价值函数的定义不依赖于时刻 t（无穷阶段情形）. 我们在后面要各种相关概念的定义都需要用到这个性质，证明都是类似的，不再赘述.

接下来我们展示价值函数的计算方法. 直观上说，回报应该被被分解为两部分：即时回报 R_{t+1}以及未来的回报 $\gamma v(S_{t+1})$，也就是下一个状态期望回报再做折扣. 具体来说，我们有

$$\begin{aligned}
v(s) &= \mathbb{E}(G_t|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \dots |S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1} + \gamma(R_{t+2} + \gamma R_{t+3} + \dots)|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1} + \gamma G_{t+1}|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1}|S_t = s) + \gamma\mathbb{E}(G_{t+1}|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}(R_{t+1}|S_t = s) + \mathbb{E}[\gamma v(S_{t+1})|S_t = s] \\
&= \mathcal{R}_s + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'} v(s').
\end{aligned}$$

其中倒数第二行是因为

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}(G_{t+1}|S_t = s) &= \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathbb{E}(G_{t+1}|S_{t+1} = s', S_t = s) \Pr(S_{t+1} = s'|S_t = s) \\
&= \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathbb{E}(G_{t+1}|S_{t+1} = s') \Pr(S_{t+1} = s'|S_t = s) \\
&= \sum_{s' \in \mathcal{S}} v(s') \Pr(S_{t+1} = s'|S_t = s) \\
&= \mathbb{E}[v(S_{t+1})|S_t = s].
\end{aligned}$$

我们因此得到了 **Bellman 方程**：

定理 2.3 (Bellman 方程) $v(s) = \mathcal{R}_s + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'} v(s')$.

在后面，我们将不断看到这样形式的方程，它将一个和 Markov 链有关的计算分解为当前的部分和未来的部分. 我们将这样形式的方程统称 Bellman 方程.

Bellman 方程可以用矩阵形式表达：

$$v = \mathcal{R} + \gamma \mathcal{P} v.$$

这里 v 是列向量 $v = (v(s))_{s \in \mathcal{S}}$.

写成矩阵形式之后，我们可以看到，Bellman 方程其实是一个线性方程，可以被直接解:

$$v = \mathcal{R} + \gamma \mathcal{P} v \implies (I - \gamma \mathcal{P}) v = \mathcal{R} \implies v = (I - \gamma \mathcal{P})^{-1} \mathcal{R}.$$

我们还可以有另一种观点，考虑一个映射 $f : \mathcal{S} \to \mathcal{S}$，$f(v) = \mathcal{R} + \gamma \mathcal{P} v$，那么 Bellman 方程可以被写作

$$v = f(v).$$

因此，v 是 f 的*不动点*. 在第八章，我们将系统地讨论不动点的性质以及它对于 Markov 链相关模型的重要性.

回到解 Bellman 方程，对于 n 个状态的 Markov 链，用线性方程组法的计算复杂度为 $\mathcal{O}(n^3)$. 对于较小的 MRP 可以直接解，太大的 MRP 开销太大. 对于大型 MRP，可以采用迭代算法，例如：

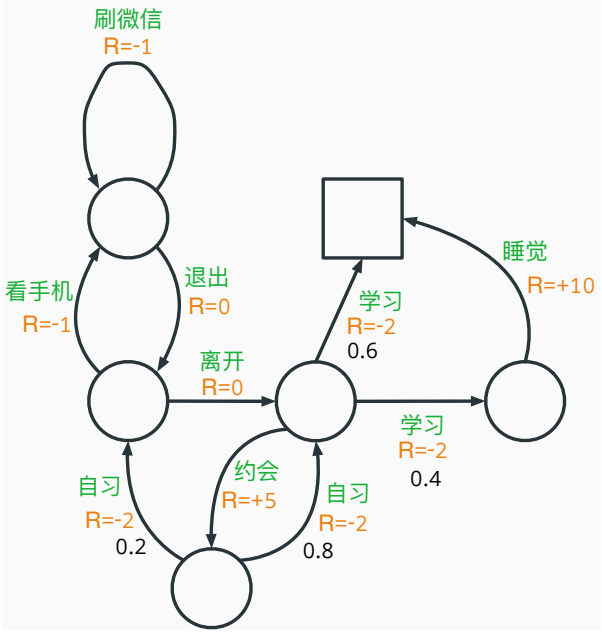
- 动态规划
- Monte-Carlo 评估
- 时序差分学习

动态规划法的思路我们将在第 2.4 节中介绍.

§2.3 Markov 决策过程（MDP）

上一节中我们建模了 Markov 链上的价值系统，即 MRP，接下来我们进入建模决策的环节. 回顾李二的例子（例 2.3），我们在 MRP 中忽略了一个非常重要的考虑：当李二坐在教室 1 中的时候，李二不是随机地开始刷手机的，他需要*选择*开始刷手机. 换言之，在 MRP 中，在当前状态可以做什么*行动*是缺失的.

此外，李二的奖励其实不是由状态决定的，而是由他做了什么行动决定的，这样，李二才能评估做什么行动可以最大化自己的奖励，然后选择奖励高的那个行动. 实际上，认知神经科学的研究表明，人体的运动控制就是由类似的机制完成的：首先，大脑皮层会提出若干不同的运动计划，这些运动计划对应了不同的奖励（由多巴胺浓度来表征），人



[lhy: 重画]

图 2.6: 学生 MDP

脑中有一个被称作基底神经节的结构，它负责“放行”奖励高于某个阈值的运动计划，于是人就可以产生这个动作了.

综合以上这些思考，我们就可以给出 *Markov 决策过程*（MDP）的模型. 我们还是先看李二的例子，然后再推广到一般的情况.

例 2.4 (李二 MDP) 李二的 MDP 见图 2.6. 在图中，状态依然是之前状态，但是状态的转移被给上了两个标签：(1) 这个转移是什么动作引起的（紫色），(2) 这个动作可以带来多少的奖励（蓝色）. 例如，当李二在教室 1 的时候，她如果选择看手机，那么就会有 -1 的奖励，并且进入刷手机的状态. □

接下来，我们给出一般的 MDP 的定义.

定义 2.5 (Markov 决策过程，MDP) **Markov 决策过程（MDP）**是一个 MDP 是五元组 $\langle \mathcal{S}, \mathcal{A}, \mathcal{P}, \mathcal{R}, \gamma \rangle$，其中

- $\mathcal{S}$ 是一个有限的状态集合.
- $\mathcal{A}$ 是一个有限的行动（action）集合.
- $\mathcal{P}$ 是状态转移概率矩阵，

$$\mathcal{P}^a_{ss'} = \Pr(S_{t+1} = s' | S_t = s, A_t = a).$$

- $\mathcal{R}$ 是一个奖励函数，$\mathcal{R}_s^a = \mathbb{E}(R_{t+1}|S_t = s, A_t = a)$，随机变量 R_{t+1} 是进行某一行动到达某一状态后的奖励.
- γ 是一个折扣系数 $\gamma \in [0,1]$.

现在我们对比 MDP 和 MRP. MDP 中，状态转移矩阵依赖动作，奖励函数也依赖动作. 在李二的例子中，在教室 2 如果选择学习，尽管都是在学习，但是学习并不一定会产生一个确定的结果：他会有 0.4 的概率睡着，0.6 的概率继续学习. 自然，睡着的奖励和继续学习的奖励是不同的.

定义 2.6 (策略) 一个策略 π 是给定状态下行动的分布，即

$$\pi(a|s) = \Pr(A_t = a|S_t = s).$$

一个策略完全决定了一个智能体在 MDP 环境中的行为. 它的定义蕴含着 Markov 性：MDP 的策略取决于当前状态，而非历史状态；也蕴含着时齐性：MDP 的策略不依赖于时刻 t. 这样的定义会方便我们讨论价值函数以及决策的问题.

MDP 与 MDP 的关系由策略给出.

命题 2.5 *给定一个 MDP $\mathcal{M} = \langle \mathcal{S}, \mathcal{A}, \mathcal{P}, \mathcal{R}, \gamma \rangle$ 和一个策略 π，$\langle \mathcal{S}, \mathcal{P}^\pi \rangle$ 是一个 Markov 链，$\langle \mathcal{S}, \mathcal{P}^\pi, \mathcal{R}^\pi, \gamma \rangle$ 是一个 MRP，其中*

$$\mathcal{P}_{s,s'}^\pi = \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}(\mathcal{P}_{s,s'}^a) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s)\mathcal{P}_{s,s'}^a,$$

$$\mathcal{R}_s^\pi = \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}(\mathcal{R}_s^a) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s)\mathcal{R}_s^a.$$

证明. 对行动利用全概率公式. □

现在我们有三个概念，MDP，MRP，以及 Markov 链，命题 2.6 给了他们三者的关系，我们可以总结到图 2.7.

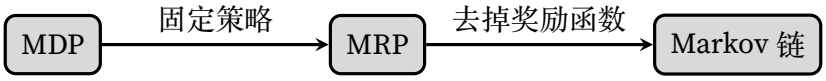


图 2.7: MDP，MRP 和 Markov 链的关系

对于李二来说，选择什么样的策略很大程度取决于他能从中获得多少奖励. 同样，在 MDP 中，我们可以定义回报的概念.

定义 2.7 (回报) 在 MDP 中，t 时刻以后的总**回报**G_t 定义为

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \gamma^k R_{t+k+1}.$$

类似 MRP，我们需要定义相应的*价值函数*. 在 MDP 中，*状态-价值函数*和*行动-价值函数*是两个重要的价值函数，它们分别描述了从某一状态出发，遵从某一策略的期望回报.

定义 2.8 (价值函数) **状态-价值函数** $v_\pi(s)$ 是从状态 s 出发，遵从策略 π 的期望回报

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}_\pi(G_t | S_t = s).$$

行动-价值函数 $q_\pi(s,a)$ 是从状态 s 出发，采取行动 a，遵从策略 π 的期望回报

$$q_\pi(s,a) = \mathbb{E}_\pi(G_t | S_t = s, A_t = a).$$

注意，类似 MRP 中的价值函数，MDP 中的价值函数定义也不依赖 t 的选择，这是因为 MDP 的 Markov 性和时齐性.

行动-价值函数比起状态-价值函数更加具体，它可以帮助李二评判在当前选择每一个行动的回报，从而选择最优的行动. 而状态-价值函数则是对行动-价值函数的一个期望，因而是李二预期他从这个状态出发的回报. 具体来说，这两个价值函数有如下关系：

命题 2.6 *状态-价值函数 $v_\pi(s)$ 和行动-价值函数 $q_\pi(s,a)$ 之间有如下关系：*

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}(q_\pi(s,a)) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s) q_\pi(s,a),$$

$$q_\pi(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} P_{s,s'}^a v_\pi(s').$$

证明. 用 $q_\pi(s,a)$ 来表示 $v_\pi(s)$，对行动 a 用全概率公式即可得到.

另一方面，用 $v_\pi(s)$ 来表示 $q_\pi(s,a)$ 也是全概率公式. 具体来说，在状态 s 采取行动 a 之后，期望上有 $\mathcal{R}_s^a$ 的即时奖励，然后以 $\mathcal{P}_{s,s'}^a$ 的概率转移到状态 s'，在状态 s' 的期望回报是 $\gamma v_\pi(s')$. 按照 s' 用全概率公式即可得到 $q_\pi(s,a)$. □

下面我们给出状态-价值函数和行动-价值函数的 Bellman 方程. 首先，价值函数可以被分解为即时回报加未来的折扣回报，具体来说

- 状态-价值函数可以被分解为：

$$v_\pi(s) = \mathbb{E}_\pi[R_{t+1} + \gamma v_\pi(S_{t+1}) | S_t = s].$$

- 行动-价值函数可以被类似地分解，

$$q_\pi(s,a) = \mathbb{E}_\pi[R_{t+1} + \gamma q_\pi(S_{t+1}, A_{t+1}) | S_t = s, A_t = a].$$

他们的计算方法和定理 2.3 中的方法类似. 继续仿照定理 2.3 的证明，我们可以得到 MDP 的 Bellman 方程：

定理 2.4 (Bellman 方程)

$$v_\pi(s) = \sum_{a\in\mathcal{A}} \pi(a|s) \left(\mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a v_\pi(s') \right),$$

$$q_\pi(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a \sum_{a'\in\mathcal{A}} \pi(a'|s') q_\pi(s',a').$$

状态-价值函数的 Bellman 方程可以被写成矩阵形式：

$$v_\pi = \mathcal{R}^\pi + \gamma \mathcal{P}^\pi v_\pi = (I - \gamma \mathcal{P}^\pi)^{-1} \mathcal{R}^\pi.$$

注意，MDP 的 Bellman 方程只能告诉我们给定策略 π 的价值函数，它并不能告诉智能体（也就是李二）要如何行动，所以，接下来我们要讨论最优策略和最优价值函数.

定义 2.9 (最优价值函数) **最优状态-价值函数** $v_\star(s)$ 是所有策略中最大的状态-价值函数

$$v_\star(s) = \max_\pi v_\pi(s).$$

最优行动-价值函数 $q_\star(s,a)$ 是所有策略中最大的行动-价值函数

$$q_\star(s,a) = \max_\pi q_\pi(s,a).$$

相应地，最优价值函数确定了智能体在 MDP 中的最佳收益，解 MDP 即确定达到最优价值函数的策略.

在以上定义中可能会遇到这样的问题：对两个状态 s_1 和 s_2，存在两个不同的策略 π_1 和 π_2，使得 $v_\star(s_1) = v_{\pi_1}(s_1)$，$v_\star(s_2) = v_{\pi_2}(s_2)$. 此时，每个状态取到最大价值的策略 π 可能并不是同一个，因此 $v_\star$ 并不是某个特定策略可以实现的值. 所以，我们需要证明，存在一个策略 $\pi_\star$，使得对于任意的策略 π，$\pi_\star$ 都取得最大价值函数.

我们有如下定理，说明了这样策略的存在性，因而也证明了 MDP 解的存在性.

定理 2.5 (MDP 解的存在性) *对任意 MDP，存在一个策略 $\pi_\star$，*

- *对任意状态 s，$v_{\pi_\star}(s) = v_\star(s)$.*

- 对任意状态 s 和行动 a，$q_{\pi_\star}(s,a) = q_\star(s,a)$.

证明. 我们给出一个构造性证明，即找出最优策略. 我们先找到一个 $\pi_\star$ 最大化 q，然后说明这个 $\pi_\star$ 也可以最大化 v.

直观上说，我们只要对每个状态都选择最好的行动，这就是一个最优策略. 具体来说，我们可以通过如下步骤找到 $\pi_\star$：

- 固定 s，
- 找到一个 $a_\star$ 最大化 $q_\star(s,\cdot)$，即 $q_\star(s,a_\star) = \max_a q_\star(s,a)$，令 $\pi_\star(a_\star|s) = 1$.
- 对其他 $a \neq a_\star$，令 $\pi_\star(a|s) = 0$.

首先，根据选法，$\pi_\star$ 取得最优行动-价值函数. 接下来我们说明，它也取得了最优状态-价值函数. 任意策略 π，给定状态 s，我们有如下计算：

$$\begin{aligned} v_\pi(s) &= \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}[q_\pi(s,a)] \\ &\leq \mathbb{E}_{a\sim\pi(\cdot|s)}[q_\star(s,a)] \\ &\leq q_\star(s,a_\star) \\ &= v_{\pi_\star}(s). \end{aligned}$$

□

这个证明还有一个推论：

推论 2.2 *对任意 MDP，总存在一个非随机的最优策略，即对任意状态 s，$\pi_\star(a|s) \in \{0,1\}$.*

两个最优价值函数之间有如下关系：

命题 2.7

$$v_\star(s) = \max_a q_\star(s,a),$$

$$q_\star(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s'\in\mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a v_\star(s').$$

证明. 在定理 2.5 的证明中，我们将 π 取为 $\pi_\star$，于是有

$$v_\star(s) = v_{\pi_\star}(s) = q_\star(s,a_\star) = \max_a q_\star(s,a).$$

对于第二个等式，根据定理 2.5，

$$v_\star(s) = v_{\pi_\star}(s), \quad q_\star(s,a) = q_{\pi_\star}(s,a),$$

在命题 2.6 取 $\pi = \pi_\star$ 即可得到. □

根据上面结论，如果我们知道 $q_\star(s,a)$ 或者 $v_\star(s)$，我们就能获得最优策略. 这一计算同样依赖 Bellman 方程[1]：

定理 2.6 (Bellman 方程)

$$v_\star(s) = \max_a \left\{ \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a v_\star(s') \right\},$$

$$q_\star(s,a) = \mathcal{R}_s^a + \gamma \sum_{s' \in \mathcal{S}} \mathcal{P}_{s,s'}^a \max_{a'} q_\star(s',a').$$

证明. 对于第一个方程，将命题 2.7 中第二个等式代入第一个等式即可得到.

对于第二个方程，将命题 2.7 中第一个等式代入第二个等式即可得到. □

Bellman 不是线性的. 因此很难有解析形式的解. 但是 MDP 的数值解是可以多项式时间求出来的. 我们一般采用迭代算法求解：

- 价值迭代
- 策略迭代
- Q-learning
- Sarsa

求解 MDP 的过程实际上就是人工智能中强化学习的核心步骤. 在本节的开头，我们说过人脑运动控制机制. 实际上，绝大部分的哺乳动物都具备类似这样的学习机制：通过奖励的反馈，动物可以学会如何行动，从而获得最大的奖励. 这样的学习机制被称为强化学习. 强化学习在很多复杂交互的环境中都有广泛的应用，例如围棋的 AlphaGo、星际争霸的 AlphaStar 等.

> **注.** Bellman 方程是强化学习、经济学动态优化的核心. Bellman 方程的推导是 Markov 链中最为常用的技巧：考虑从当前状态转移到下一状态，利用全概率公式，一步转移会将两个状态之间的概率（期望）用递推公式联系起来. 在随机过程中，有大量这样的例子：前向方程、*Wald* 等式、调和函数. 后面的*HMM* 也是类似的例子.

最后，我们谈谈深度强化学习. 在一些非常复杂的情况下（例如下围棋），使用经典的迭代算法并不容易求解 MDP. 深度强化学习是一种结合了深度学习和强化学习的方法. 在深度强化学习中，用神经网络来表示 π 和 v，之后，用某种学习算法训练神经网络.

[1]在文献中，这一 Bellman 方程被称为 Bellman 最优性方程，而之前推导的 Bellman 方程被称为 Bellman 期望方程. 为了不过度引入术语，我们这里不做这种区分.

在一些深度强化学习模型中（例如 AlphaZero），状态空间 $\mathcal{S}$ 也用一个神经网络表示. 用神经网络来表示状态空间的好处是可以减少人类的特征工程，让神经网络充分发掘状态空间好的表示方法.

在很多深度强化学习模型中（例如 AlphaGo），MDP 的策略是基于过去 k 期的状态做当前的决策，这样可以更好地利用状态的历史信息. 这样的决策模型等价于一个利用一期信息决策的 MDP（见习题[lhy: 出一下]），因此依然可以用同样的深度学习算法来求解.

§2.4 隐 Markov 模型（HMM）

在本节，我们考虑 Markov 链上的另一种应用. 在统计学和机器学习中，我们有时候要处理一类含时间的数据. 例如，如果我们希望利用机器的力量帮助我们炒股赚钱，就要考虑如何预测股价然后做出相应的决策，这样的投资模式被称为*量化投资*. 在 1989 年到 2009 年间，量化界的传奇人物 James Simons 操盘大奖章基金，平均年回报率高达 35%，即便是在次贷危机爆发的 2007 年，该基金的回报率仍高达 85%. 据说，让 Simons 成功的秘诀是*隐 Markov 模型*，这正是本节的主题.

我们先给出隐 Markov 模型的定义.

定义 2.10 (隐 Markov 模型，HMM) 一个**隐 Markov 模型**（**HMM**）是两列随机变量（被称为*观测序列*）$X_1, X_2, \ldots,$ 和 $z_1, z_2, \ldots,$（被称为*隐状态序列*）的序列，满足：

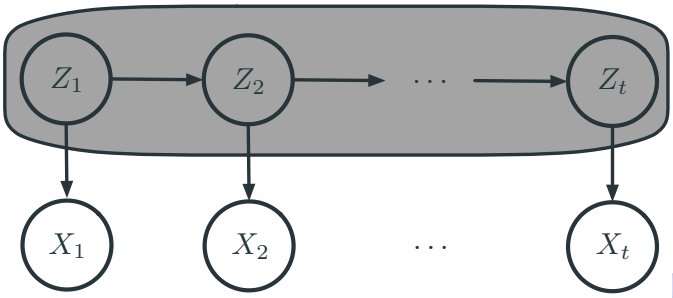
- $\{Z_t\}$ 构成一条 Markov 链.
- 对任意 t，X_t 的分布仅依赖于 Z_t.
- 对于任意 t，$\Pr(X_t|Z_t)$ 服从分布 $F(Z_t)$.

示意见图 2.8.

为了理解这一概念，我们可以考虑炒股的例子.

例 2.5 (美为 HMM) 假设我们要投资美为的股票，第 t 天的股票价格是 X_t. 我们很希望理解整个 X_t 的变化趋势. 然而，美为股价的背后有一个神秘势力操控. 我们并不清楚这个神秘势力每天决策的具体细节，只知道他们的决策非常健忘，即他们的决策只依赖于前一天的决策. 他们会决定一个明天的预计股价 Z_t，这构成了一个 Markov 链 $\{Z_t\}$.

因为市场和汇率的波动，这个神秘势力无法完全决定股票的价格 X_t，然而，他们每一天所决定的预期价格 Z_t 会导致股票价格的变化，我们可以认为 X_t 仅依赖于 Z_t，但依



[lhy: 重画]

图 2.8: 隐 Markov 模型

然受到一些随机因素的影响. 作为简化，我们假设每天的随机影响是独立且一致的，服从分布 $F(Z_t)$. 这样的得到的模型就是一个 HMM. □

接下来，我们给 HMM 引入一些记号. 为简便起见，我们只研究有限离散的 HMM. 设 HMM $\mathcal{M}$ 所形成的概率测度是 $\Pr_{\mathcal{M}}$. 我们假设模型中以下的量都是已知的：

- $\mathcal{Z}$: 有限的状态集合，即 Z_t 的取值集合.
- $\mathcal{X}$: 有限的观测集合，即 X_t 的取值集合.
- T：Markov 链 $\{Z_t\}$ 的转移矩阵，$T_{i,j} = \Pr_{\mathcal{M}}(Z_{t+1} = j | Z_t = i)$.
- M：给定隐状态时的观测概率，$M_{i,k} = \Pr(X_t = k | Z_t = i)$.
- λ：隐状态的初始分布.

我们会把序列 $A_i, \ldots, A_j$ 记作 $A_{i:j}$，然后将它看作一个向量. 例如 $X = X_{1:t}$ 就是描述从时刻 1 到 t 的观测序列的随机向量，而 $Z = Z_{1:t}$ 就是描述从时刻 1 到 t 的隐状态序列的随机向量.

为了理解 HMM 的任务，我们接着看美为的例子. 假设我们已经知道一个 HMM $\mathcal{M}$ 可以预测美为的股价 X_t，作为一个使用者，我们希望 $\mathcal{M}$ 确实有用. 因此，我们要*评估*这个模型的表现. 具体来说，我们希望知道，给定观测历史 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_t)$，如何计算 $\Pr_{\mathcal{M}}(X = x)$. 这一方法也可以用来做*预测*：利用全概率公式，我们可以计算 $\Pr_{\mathcal{M}}(X_{t+1} = x_{t+1} | X = x)$，从而预测未来的股价.

评估一个 HMM 固然重要，但是评估依然是把 HMM 当成一个黑盒来使用. 我们还希望知道这个模型背后到底发生了什么，这就是*解释*问题. 具体来说，我们希望知道，给定观测历史 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_t)$ 以及一个时刻 k，如何计算 $\Pr_{\mathcal{M}}(Z_k | X = x)$. 这一分布表明了在 k 时刻神秘势力更有可能做了什么样的决策，从而帮助我们更好理解股价的波动.

接下来我们将分别阐述如何解决评估问题和解释问题. 因为我们只讨论某一个具体的 HMM，为简便起见，我们此后都将概率测度 $\Pr_{\mathcal{M}}$ 简记为 $\Pr$.

§2.4.1 评估问题

我们引入记号随机向量 $X = (X_1, \ldots, X_t)$，$Z = (Z_1, \ldots, Z_t)$. 我们考虑 HMM 的评估问题：给定一个 HMM $\mathcal{M}$，以及它的观测历史 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_t)$，计算 $\Pr(X = x)$.

关键困难是我们不知道隐状态历史 $Z = (z_1, z_2, \ldots, z_t)$，因此我们需要利用全概率公式将隐状态消除掉，即：

$$\Pr(X = x) = \sum_{Z=(z_1,\ldots,z_t)\in\mathcal{Z}^t} \Pr(X = x|Z = z)\Pr(Z = z).$$

接下来我们分别计算 $\Pr(X = x|Z = z)$ 和 $\Pr(Z = z)$. 对于前者，因为每一个观测值 X_i 仅依赖于 Z_i，我们有

$$\Pr(X = x|Z = z) = \prod_{i=1}^{t} \Pr(X_i = x_i|Z_i = z_i) = M_{z_1,x_1} \cdot M_{z_2,x_2} \ldots M_{z_t,x_t},$$

对于后者，因为 Z 是一个 Markov 链，我们有

$$\begin{aligned}\Pr(Z = z) &= \Pr(Z_1 = z_1) \prod_{i=2}^{t} \Pr(Z_i = z_i|Z_{i-1} = z_{i-1}) \\ &= \lambda_{z_1} \cdot T_{z_1,z_2} \cdot T_{z_2,z_3} \ldots T_{z_{t-1},z_t}.\end{aligned}$$

以上的量都是已知的，所以我们已经可以计算评估问题了. 然而，这一方法的需要计算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^t)$，对于很大的 t 和 $\mathcal{Z}$，这是不可接受的计算量. 我们需要更好的计算方法.

接下来，我们采用前向方程（见定理 2.1）的思路，从前 k 步的结果推出前 $k+1$ 步的结果，然后据此列出递推方程. 在第 $k+1$ 步，Markov 链的状态发生了转移，按照从哪个状态转移到了哪个状态，我们可以拆分概率：

$$\begin{aligned}&\Pr(X_{1:k+1} = x_{1:k+1}) \\ =& \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = z) \Pr(X_{k+1} = x_{k+1}|Z_k = z) \\ =& \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = z) \sum_{z'\in\mathcal{Z}} \Pr(Z_{k+1} = z'|Z_k = z) \Pr(X_{k+1} = x_{k+1}|Z_{k+1} = z') \\ =& \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = z) \sum_{z'\in\mathcal{Z}} T_{z,z'} M_{z',x_{k+1}}.\end{aligned}$$

如果把左边按照 Z_{k+1} 拆分，我们有

$$\sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k+1}=x_{1:k+1}, Z_{k+1}=z) = \sum_{z\in\mathcal{Z}} \Pr(X_{1:k}=x_{1:k}, Z_k=z) \sum_{z'\in\mathcal{Z}} T_{z,z'} M_{z',x_{k+1}}.$$

如果令 $\alpha_k(z) := \Pr(X_{1:k}=x_{1:k}, Z_k=z)$，用类似的计算，我们有递推：

- 当 $k=1$，$\alpha_k(z) = \lambda(z) M_{z,x_k}$.
- 当 $k>1$，$\alpha_{k+1}(z) = \sum_{z'\in\mathcal{Z}} \alpha_k(z') T_{z',z} M_{z,x_{k+1}}$.

最后，$\Pr(X=x) = \sum_{z\in\mathcal{Z}} \alpha_t(z)$. 这一方法需要算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^2)$，比前一种计算方法要快很多.

镜像地，我们可以使用后向方程的思路，从前 $k+1$ 步的结果推出前 k 步的结果. 同样可以列出递推方程. 定义 $\beta_k(z) := \Pr(X_{k+1:t}=x_{k+1:t}|Z_k=z)$，我们有递推：

- 当 $k=t$，$\beta_k(z)=1$.
- 当 $1\le k<t$，$\beta_k(z) = \sum_{z'\in\mathcal{Z}} T_{z,z'} M_{z',x_{k+1}} \beta_{k+1}(z')$.

于是，$\Pr(X=x) = \sum_{z\in\mathcal{Z}} \lambda(z) M_{z,x_1} \beta_1(z)$. 这一方法需要算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^2)$.

§2.4.2 解释问题

接下来我们讨论 HMM 的*解释问题*. 给定一个 HMM $\mathcal{M}=(\mathcal{Z},\mathcal{X},T,M,\lambda)$, 一列观测历史 $x=(x_1,x_2,\dots,x_t)$, 解释问题旨在寻找一个状态序列，能最好地解释这些历史观察. 具体来说我们考虑如下四个问题：

1. *过滤*：计算 $\Pr(Z_k=s|X_{1:k}=x_{1:k})$.
2. *平滑*：计算 $\Pr(Z_k=s|X=x)$，$k<t$.
3. *预测*：计算 $\Pr(Z_k=s|X=x)$，$k>t$.
4. *解码*：找到最有可能的状态序列 $z=(z_1,z_2,\dots,z_t)$.

首先考虑过滤：$\Pr(Z_k=s|X_{1:k}=x_{1:k})$. 回顾记号 $\alpha_k(s)=\Pr(X_{1:k}=x_{1:k},Z_k=s)$, 这其实已经足够我们计算过滤了. 根据条件概率的定义，我们有

$$\begin{aligned}\Pr(Z_k=s|X_{1:k}=x_{1:k}) &= \frac{\Pr(X_{1:k}=x_{1:k},Z_k=s)}{\Pr(X_{1:k}=x_{1:k})}\\ &= \frac{\alpha_k(s)}{\sum_{z\in\mathcal{Z}}\alpha_k(z)}.\end{aligned}$$

我们已经知道如何计算 $\alpha_k(s)$，所以这就可以用来计算过滤了.

然后是平滑：$\Pr(Z_k = s|X = x)$，$k < t$. 回顾记号 $\alpha_k(s) = \Pr(X_{1:k} = x_{1:k}, Z_k = s)$，以及 $\beta_k(s) = \Pr(X_{k+1:t} = x_{k+1:t}|Z_k = s)$. 可以证明（见习题[lhy: 出一下]）：

$$\Pr(z_k = s|X = x) = \frac{\beta_k(s)\alpha_k(s)}{\sum_{z\in\mathcal{Z}} \alpha_t(z)}. \tag{2.5}$$

同样，我们已经知道如何计算 $\alpha_k(s)$ 和 $\beta_k(s)$，所以这就可以用来计算平滑了.

之后是预测：$\Pr(Z_k = s|X = x)$，$k > t$. 首先用过滤计算 $\lambda = \Pr(Z_t = s|X = x)$. 从 t 之后的隐状态都只依赖于 t 时刻的隐状态 Z_t，因此，条件在 $X = x$ 下，$Z_t, Z_{t+1}, \ldots, Z_k$ 构成了一个 Markov 链，它的初始分布为 λ，转移矩阵为 T. 于是我们利用定理 2.1 来计算该 Markov 链第 $k - t$ 步的分布.

最后是解码：求 $z = (z_1, z_2, \ldots, z_t)$，使得 $\Pr(Z = z|X = x)$ 最大. 注意，这一概率最大等价于 $\Pr(Z = z, X = x)$ 最大. 我们也使用递归的想法来解决这个问题. 同样，在前 $k - 1$ 个状态已经选好之后，考虑最后一个状态应该选哪个. 具体来说，定义

$$\delta_k(s) = \max_{z_{1:k-1}} \Pr(Z_{1:k} = (z_{1:k-1}, s), X_{1:k} = x_{1:k}).$$

于是

$$\begin{aligned}
&\delta_{k+1}(s) \\
&= \max_{z_{1:k}} \Pr(Z_{1:k+1} = (z_{1:k}, s), X_{1:k+1} = x_{1:k+1}) \\
&= \max_{z_{1:k}} \{\Pr(Z_{1:k} = z_{1:k}, X_{1:k} = x_{1:k}) \Pr(Z_{k+1} = s|Z_k = z_k) \Pr(X_{k+1} = x_{k+1}|Z_{k+1} = s)\} \\
&= \max_{q} \{\max_{z_{1:k-1}} \Pr(Z_{1:k} = (z_{1:k-1}, q), X_{1:k} = x_{1:k}) T_{q,s}\} M_{s,x_{k+1}} \\
&= \max_{q} \{\delta_k(q) T_{q,s}\} M_{s,x_{k+1}}.
\end{aligned}$$

这就给出了从 k 推导到 $k + 1$ 的递推方程. 这一递推的初始状态是

$$\delta_1(s) = \Pr(Z_1 = s, X_1 = x_1) = \Pr(Z_1 = s) \Pr(X_1 = x_1|Z_1 = s) = \lambda(s) M_{s,x_1}.$$

利用这一递推，我们就可以解决解码问题了. 具体算法在下面给出.

1. 利用递推公式，逐层用第 k 层的 δ_k 计算第 $k + 1$ 层的 δ_{k+1}，最后得到 δ_t.
2. 求一个 z_t^* 使得 $\delta_t(z_t^*)$ 最大，根据定义，这个 z_t^* 也使得 $\Pr(Z = z, X = x)$ 最大，把这个最大值记为 δ_t^*.

3. 接下来，逐层用第 $k+1$ 层的 δ_{k+1}^* 计算第 k 层的 δ_k^* 和 z_k^*. 已知

$$\delta_{k+1}^* = \delta_{k+1}(z_{k+1}^*) = \max_q \{\delta_k(q) T_{q,z_{k+1}^*}\} M_{z_{k+1}^*, x_{k+1}},$$

从中找到一个 q 使得 $\delta_k(q) T_{q,z_{k+1}^*}$ 最大，记此时的 $\delta_k(q)$ 为 δ_k^*，$z_k^* = q$.

4. 最后，我们就得到了最优的状态序列 $z = (z_1^*, z_2^*, \ldots, z_t^*)$，使得 $\Pr(Z = z, X = x)$ 最大.

以上算法被称为 *Viterbi 算法*，是解码问题的一个高效算法，它需要计算的乘法次数是 $\mathcal{O}(t|\mathcal{Z}|^2)$. 这一算法采用了*动态规划*的思想，实际上大部分和 Bellman 方程有关的问题（特别是最优化的问题）都可以用这一方法解决.

§2.5 扩散模型

本节我们讨论基于 Markov 链的另一种模型，即扩散模型. 不同于之前的模型，扩散模型的启发来自物理学. 滴一滴墨水到水中，最后墨会均匀地在水中分布，这一过程不会反过来，即墨水不会自动聚集到一起. 同样的现象在热力学中也有体现：如果把金属勺子的一端放在热水中，热量会从热水中通过勺子传导到勺子的另一端，最终整个勺子会均匀地变热，而不会反过来. 这些现象都是*扩散过程*. 本节的主要任务就是为这一过程建立数学模型，并讨论它的应用.

我们先看墨水的例子.

例 2.6 (墨水的扩散) 墨水的扩散有一个具体的数学模型，即 *Ehrenfest 模型*.

模型如图 2.9 所示. 在这个模型中，一共有两个箱子 A 和 B，我们可以想象成这是水杯的上半部分和下半部分. 两个箱子里一共 N 个球，我们可以想象成这是墨水分子. 每个时刻，有很小的概率 $\alpha > 0$，盒子 A 和 B 中的球会保持不动；另外的 $1-\alpha$ 的概率，我们均匀随机选择一个球，从一个箱子跳到另一个箱子，这就是扩散的过程.

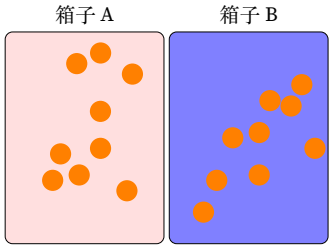


图 2.9: Ehrenfest 模型示意图

设 X_k 是盒子 A 中球的数目，那么 $\{X_k\}$ 是一个 Markov 链，它的转移核[2]是

$$\Pr(X_{k+1}=i|X_k=j)=\begin{cases}\alpha, & i=j,\\ (1-\alpha)j/N, & i=j-1,\\ (1-\alpha)(N-j)/N, & i=j+1,\\ 0, & \text{其他.}\end{cases}$$

下面我们来解释为什么墨水最终会均匀分布在水中. 从遍历定理（定理 2.2）我们知道，对于一个遍历的 Markov 链，无论初始分布是什么，Markov 链最终都会收敛到唯一平稳分布. 可以证明（见习题[lhy: 出一下]），$\{X_k\}$ 是一个遍历的 Markov 链，所以它会收敛到一个平稳分布 $\pi\sim B(N,1/2)$.

根据二项式的性质，该分布在 $N/2$ 附近取到最大值，因此，这是墨分子最有可能的分布情况. 更精细的结论是（见习题[lhy: 出一下]），对任意 $\epsilon>0$，当 N 充分大的时候，

$$\Pr\left(\limsup_{k\to\infty}\left|\frac{X_k}{N}-\frac{1}{2}\right|<\epsilon\right)\approx 1.$$

换言之，几乎以概率 1，分子会均匀分布在两个箱子中，即墨水会均匀地分布在水中. □

以上例子告诉我们，物理过程几乎是不可逆的. 然而，如果我们仔细记录每一步扩散的过程，我们可以尝试倒推 X_0 的分布. 这就是扩散模型的基本思想. 下面给出扩散模型的定义.

定义 2.11 (扩散模型) **扩散模型**由随机变量 $x_0,\dots,x_T$ 给出，它包含两个过程：

- **扩散过程**：从 x_0 到 x_T 的 Markov 链，它的核是 $q(x_{k+1}|x_k)$，也叫**正向过程**. 通常，扩散模型是连续型随机变量，所以，核是一个转移密度函数.
- **逆向过程**：从 x_T 到 x_0 的 Markov 链，它的核是 $p(x_{k-1}|x_k)$. 通常，扩散模型是连续型随机变量，所以，核是一个转移密度函数.

注意，扩散过程和逆向过程都是非时齐的 Markov 链. 假设扩散过程是一个 Markov 链，那么逆向过程必须是一个 Markov 链，所以上述定义是良定义的（见习题[lhy: 出一下]）.

[2]我们在前面都说的是*转移矩阵*，然而，在扩散模型这一部分，*转移核*是一个更恰当的表述. 这是因为，我们之前处理的大部分 Markov 链都是离散的状态空间，而这一部分处理的状态空间既有离散的也有连续的，所以“矩阵”并不是一个恰当的词汇.

除了物理过程，还有很多其他的场景也可以被看成扩散模型. 比如，我们可以将一张图片看成刚滴入墨水的水杯：它有结构，不是混乱无序的. [3] 而水则可以看作一张由 Gauss 噪声生成的图片：它是随机的，缺乏结构. 于是，墨分子扩散就可以被理解为一张有结构的图片逐渐变成噪声的过程.

在这种理解下，扩散过程就是图片加噪声的过程，逆向过程就是去噪的过程. 尽管通过加噪，所有的图片都会变成噪声，然而，噪声与噪声之间细微的区别仍然是可以被区分的. 于是，我们可以通过逆向过程，从噪声中恢复出原始的图片.

如果我们通过大量的图片训练了一个扩散模型，那么我们就可以用它来凭空生成图片. 首先，我们随机生成一个噪声图片 x_T，然后通过逆向过程，我们就可以回到有结构的原始图片 x_0. 因此，扩散模型可以被用作*生成模型*.

我们接下来都会以*去噪扩散概率模型*（*DDPM*）为例来讨论扩散模型，它是一个用来生成图片的神经网络模型. DDPM 的过程如图 2.10 所示.

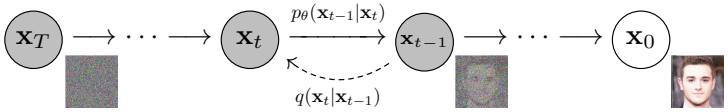


图 2.10: DDPM 示意图

DDPM 中的 Markov 核都是 Gauss 分布，具体如下：

- 扩散过程：假设真实图片的分布是 $q(x_0)$，这就应该 x_0 的初始分布. 扩散过程从 x_{t-1} 到 x_t 就是在 x_{t-1} 上加上一个小的 Gauss 噪声扰动，因此我们可以写出它的转移核和初始分布：

$$q(x_t|x_{t-1}) := \mathcal{N}(x_t; \sqrt{1-\beta_t}x_{t-1}, \beta_t\mathbf{I}), \quad x_0 \sim q(x_0).$$

  这里 β_t 是一个超参数，$\mathcal{N}(x;\mu,\Sigma)$ 是 Gauss 分布 $\mathcal{N}(\mu,\Sigma)$ 在点 x 的概率密度.

- 逆向过程：扩散的末端 x_T 是一个完全的 Gauss 噪声，我们不妨设它是标准 Gauss 分布，即 $x_T \sim \mathcal{N}(0,\mathbf{I})$. 逆向过程希望从 x_t 恢复到 x_{t-1}，因此我们应该用 x_t 和 t 来预测 x_{t-1} 的期望，我们用一个神经网络 $\mu_\theta(x_t,t)$ 来表示这个期望. 于是，逆向过程的转移核和初始分布为：

$$p_\theta(x_{t-1}|x_t) := \mathcal{N}(x_{t-1}; \mu_\theta(x_t,t), \sigma_t^2\mathbf{I}), \quad p(x_T) = \mathcal{N}(x_T; \mathbf{0}, \mathbf{I}).$$

  这里 σ_t 是一个超参数.

[3] 有趣的是，古代中国和西方真的有在水面上撒颜料来作画的技法，也就是在水上撒颜料，然后用纸张把颜料印下来. 在中国，这种技法叫*湿拓画*. 在西方，这种技法叫 *marbling* 或者 *ebru*（来自土耳其语）.

根据我们的上面的讨论，扩散模型有两个任务：

1. 训练一个逆向过程，使得 $p_\theta(x_0)$ 尽可能接近数据的分布 $q(x_0)$.

2. 采样一个逆向过程，对一个训练好的扩散模型，这个步骤可以从噪声 x_T 出发生成一张有结构的图片 x_0.

对于第一步，我们需要将训练的损失函数写出. 对于第二步，我们需要一个采样的方法. 由于采样比训练更简单，而且训练依赖采样，所以我们会先讨论采样.

§2.5.1 采样逆向过程

因为逆向过程是一个 Markov 链，我们需要能够采样一个 Markov 链的状态序列. 因为随机变量之间有相互依赖关系，Markov 链的采样不是那么平凡的. 但是，Markov 性给了我们一种采样的方法.

考虑 Markov 链 X_k，转移核为 $p(i,j)$，初始分布为 λ. 我们可以通过以下方法采样 X_k：

1. 从初始分布 λ 采样 X_0.

2. 对于 $k=1,2,\dots$，从 $p(X_{k-1},\cdot)$ 采样 X_k.

根据 Markov 性，在给定 X_{k-1} 的情况下，X_k 的分布只依赖于 X_{k-1}，所以这一采样方法可以正确地采样 X_k. 根据这一原则，我们可以很具体地将逆向过程的采样算法写出.

1. $x_T \sim \mathcal{N}(0,\mathbf{I})$

2. 对 $t=T,\dots,1$，重复以下步骤采样 x_{t-1}：

   (1) 如果 $t\geq 1$，采样 $z\sim\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$；否则，$z=0$.

   (2) $x_{t-1}=\mu_\theta(x_t,t)+\sigma_t z$.

3. 输出 x_0.

为了和后面训练部分对应，我们需要将 2.(2) 中的步骤重写为另一个等价的形式，现在可以先不管为什么要这么做. 令 $\alpha_t=1-\beta_t$，$\bar{\alpha}_t=\prod_{s=1}^{t}\alpha_t$，$\epsilon_\theta(x_t,t)$ 是 $\mu_\theta(x_t,t)$ 的重参数化：

$$\mu_\theta(x_t,t)=\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\epsilon_\theta(x_t,t)\right).$$

于是，我们可以将 2.(2) 重写为：

$$x_{t-1}=\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\epsilon_\theta(x_t,t)\right)+\sigma_t z.$$

§2.5.2 训练逆向过程

接下来我们讨论训练逆向过程的损失函数. 我们需要衡量 $p(x_0)$ 和 $q(x_0)$ 的差异，一个常用的选择是交叉熵，我们将会在下一章中详细讨论这一概念. 此时，我们先接受交叉熵的概念，将损失函数写为：

$$\mathbb{E}_q[-\log p_\theta(x_0)] = -\int q(x_0)\log p_\theta(x_0)\mathrm{d}x_0.$$

为计算这一表达式，我们需要将 $p_\theta(x_0)$ 的表达式算出. 类似 HMM，我们用 $x_{i:j}$ 表示 $x_i, \ldots, x_j$.

根据全概率公式：

$$\begin{aligned}
p_\theta(x_0) &= \int p_\theta(x_{0:T})\,\mathrm{d}x_{1:T} \\
&= \int p_\theta(x_{0:T})\frac{q(x_{1:T}|x_0)}{q(x_{1:T}|x_0)}\mathrm{d}x_{1:T} \\
&= \int q(x_{1:T}|x_0)\frac{p_\theta(x_{0:T})}{q(x_{1:T}|x_0)}\mathrm{d}x_{1:T} \\
&= \int q(x_{1:T}|x_0)\,p_\theta(x_T)\prod_{t=1}^{T}\frac{p_\theta(x_{t-1}|x_t)}{q(x_t|x_{t-1})}\mathrm{d}x_{1:T}.
\end{aligned}$$

接下来，我们计算并放缩损失函数，最终得到容易利用梯度进行优化[4] 的形式：

$$\begin{aligned}
K &= -\int q(x_0)\log p(x_0)\,\mathrm{d}x_0 \\
&= -\int q(x_0)\cdot\log\left[\int q(x_{1:T}|x_0)\cdot p(x_T)\prod_{t=1}^{T}\frac{p(x_{t-1}|x_t)}{q(x_t|x_{t-1})}\mathrm{d}x_{1:T}\right]\mathrm{d}x_0.
\end{aligned}$$

利用 Jensen 不等式（定理 C.17），$\log(\int qf\mathrm{d}x) \geq \int q\log(f)\mathrm{d}x$，这可以被放缩为：

$$K \leq -\int q(x_{0:T})\log\left[p(x_T)\prod_{t=1}^{T}\frac{p(x_{t-1}|x_t)}{q(x_t|x_{t-1})}\right]\mathrm{d}x_{0:T} := L.$$

可以证明（留到下章作业），L 可以被写作：

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_q[&\underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(x_T|x_0)\,\|\,p(x_T))}_{L_T} + \\
&\sum_{t>1}\underbrace{D_{\mathrm{KL}}(q(x_{t-1}|x_t,x_0)\,\|\,p_\theta(x_{t-1}|x_t))}_{L_{t-1}}\underbrace{-\log p_\theta(x_0|x_1)}_{L_0}],
\end{aligned}$$

其中 $D_{\mathrm{KL}}(f\|g) = \int f\log(f/g)\mathrm{d}x$ 是 K-L 散度.

接下来我们分别讨论每一部分的计算.

[4] 对于优化相关的详细讨论，见第三部分.

- L_T 不含参数，所以可以丢掉.
- L_0 和输出的数据格式有关（例如图片如何编码），需要具体问题具体处理，所以这里不讨论.
- 唯一需要处理的是 L_1 到 L_{T-1} 的计算.

由于 $p_\theta\left(x_{t-1}|x_t\right)=\mathcal{N}\left(x_{t-1};\mu_\theta\left(x_t,t\right),\sigma_t^2\mathbf{I}\right)$，可以算得（见习题[lhy: 出一下]）：

$$L_{t-1}=\mathbb{E}_q\left[\frac{1}{2\sigma_t^2}\left\|\tilde{\mu}_t\left(x_t,x_0\right)-\mu_\theta\left(x_t,t\right)\right\|^2\right]+C,$$

其中 C 是一个不含 θ 的常数，并且

$$\tilde{\mu}_t\left(x_t,x_0\right):=\frac{\sqrt{\bar{\alpha}_{t-1}}\beta_t}{1-\bar{\alpha}_t}x_0+\frac{\sqrt{\alpha_t}\left(1-\bar{\alpha}_{t-1}\right)}{1-\bar{\alpha}_t}x_t.$$

因为 C 是一个常数，我们可以丢弃它而不影响最优值. 接着，利用重参数化

$$\mu_\theta(x_t,t)=\frac{1}{\sqrt{\alpha_t}}\left(x_t-\frac{1-\alpha_t}{\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}}\epsilon_\theta(x_t,t)\right),$$

引入随机变量 $\epsilon\sim\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$，我们可以将 L_{t-1} 写作：

$$\mathbb{E}_{x_0,\epsilon}\left[\frac{\beta_t^2}{2\sigma_t^2\alpha_t\left(1-\bar{\alpha}_t\right)}\left\|\epsilon-\epsilon_\theta\left(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0+\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\epsilon,t\right)\right\|^2\right].$$

如果我们想用基于梯度方法对它进行优化，我们需要计算它的梯度. 然而，这是一个期望，没有办法直接求梯度，所以我们用采样到的 x_0 和 ϵ 代替期望中的 x_0 和 ϵ，把它当成期望来求梯度.

另外，如果把所有 L_{t-1} 都用来训练，当总时长 T 非常大的时候，训练也会非常困难，所以在实际训练中，我们会均匀随机选择一个 t，对 L_{t-1} 进行优化.

最终，我们得到了扩散模型的训练算法：

- 重复以下步骤直到收敛：
  - 采样 $x_0\sim q\left(x_0\right)$.
  - 采样 $t\sim\mathcal{U}(\{1,\ldots,T\})$.
  - 采样 $\epsilon\sim\mathcal{N}(0,\mathbf{I})$.
  - 用下面的梯度做一次优化：

$$\nabla_\theta\left\|\epsilon-\epsilon_\theta\left(\sqrt{\bar{\alpha}_t}x_0+\sqrt{1-\bar{\alpha}_t}\epsilon,t\right)\right\|^2.$$

§2.6 章末注记

[lhy: TODO]

Euclid 在他伟大的《几何原本》[5]最早尝试将数学整理为一个完整的公理系统.

§2.7 习题

[lhy: TODO]

[5]实际上，Euclid 的书名直译是“原理”，并没有“几何”一词. 这说明 Euclid 其实在探求某些更加本质的东西，这样的思想后来被发展为了我们今天的形式推理系统或公理系统.

第二部分

信息与数据

第三章　熵与 Kullback-Leibler 散度

人脑和机器的区别是什么？我们有可能模拟人脑的功能吗？这些问题根植于认知科学和人工智能领域。在 20 世纪 50 年代，计算机科学、认知科学和人工智能仍然处于萌芽状态。就是在这个时候，基于对人类如何解决问题和决策的研究，Herbert A. Simon 提出，人脑其实是一个“信息处理器”，也就是输入信息（视觉、听觉等），进行处理，然后输出信息（动作、语言等）。从这个观点上，人脑和机器并无区别。

基于这样的观点，Simon 和 Allen Newell、J. C. Shaw 一起合作，制造了逻辑理论家（Logic Theorist）、通用问题求解器（General Problem Solver，GPS）等计算机程序。逻辑理论家可以证明《数学原理》（作者是 Whitehead 和 Russell）第二章前 52 个定理中的 38 个，而 GPS 则可以解决汉诺塔问题。这展现出“信息处理器”观点的巨大潜力。

时至今日，“信息处理器”的观点已经深入认知科学和人工智能研究者的心中。然而，信息是一个特别抽象的概念。它不像重量，可以从沉甸甸的铅块中直观感受到。那么，信息到底是什么？本章将要讨论这一问题，并给出它在人工智能领域的应用。

§3.1　熵

§3.1.1　概念的导出

我们常说“恐惧来源于未知”，信息似乎代表着某种确定的东西，某种知识，因而和不确定性有相反的关系. 更精确地说，消除不确定性的东西被称为信息. 当然，这句话本身似乎是一种循环解释，它既没有回答信息是什么也没有回答不确定性是什么. 所以我们进一步的问题是，给定一个“对象”，如何定量衡量它不确定性（或信息量）?

我们先从一个例子看起。

例 3.1 (信息论读本) 假设我们有一个信息论的读本（例如本章就是），我们想要衡量它的信息量。我们面临的第一个困难是，同样的内容对于不同的人来说，信息量是完全不同

的. 已经学过信息论的读者再看这一部分内容，他获得的信息会比没有学过的读者要少得多. 因此，我们很难直接给单个对象衡量它的信息量。

但是，信息论读本的读者背景是多样的、不确定的，可能学过信息论，可能只学过概率论，也可能什么都没学过. 要衡量这本书的信息量，我们可以考虑所有可能的读者背景，然后给出一个信息的概率分析. 例如，读这本书的读者大概率不是信息论专家，但有一定概率论的背景，他们可以获得很多信息；而还有很少部分读者精通信息论，因此这本书给他们的信息量就很少. 但综合来看，这本书的信息量依然是不少的。 □

以上例子说明了这样一种思想：将世界视为不确定的，有多种可能的结果，然后考虑这一堆结果所带来的平均信息量.

我们可以用数学来表述上面的考虑，假如我们进行一次试验，一共有 n 种可能的结果，第 i 种发生的概率为 p_i. 我们预测试验的结果，如果越能正确地预测，那么就说明我们对这个试验中包含的信息知道的越多.

- 假如 $p_1 = 1$，那么我们完全确定试验一定会产生结果 1；
- 如果 $p_i = 1/n$，那么我们完全无法预计试验的结果.

我们对试验结果的预期与试验结果的概率分布有密切联系. 因此概率分布给我们带来了信息，使得我们能够产生不同的判断. 另一方面，概率分布带来了不确定性，使我们不能总是确信预言会成真.

我们遵循“信息论之父”Shannon 的思路，为信息提供一个严格的数学模型：熵. 假设随机变量 X 表示了所有可能的结果（编号为 1 到 n），$\Pr(X = i) = p_i$，$p = (p_1, \ldots, p_n)$，有时候也把 p_i 写作 $p(i)$. 我们把不确定性度量记为 $H(p)$. Shannon 假设 H 满足以下三个性质：

1. H 是一个连续函数.
2. 事件结局可能数变多则不确定性增大：$p_i = 1/n$ 时，$H(p)$ 随 n 单调递增，n 是正整数.
3. 如果一个试验被分成了两个相继的试验，那么原来的 H 应该等于分开之后的 H 的加权和.

前两个假设都比较好理解，我们现在具体解释第三个假设.

如图图 3.1 所示，假设我们有一个试验，有三种可能的结果，1,2,3，概率分别为 $1/2, 1/3, 1/6$. 该试验的不确定性是 $H(1/2, 1/3, 1/6)$.

我们把试验分成两步相继的试验（右图）。第一步试验有两种可能的结果，概率分别都是 $1/2$.

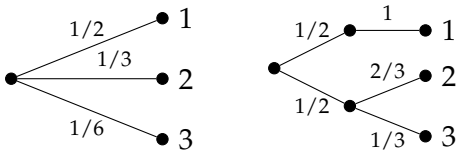


图 3.1: Shannon 的第三个假设

- 当第一步试验出现上面的结果时，第二步试验以概率 1 产生结果 1；
- 当第二步试验出现下面的结果时，第二步试验以概率 2/3 产生结果 2，以概率 1/3 产生结果 3.

我们可以看到，分成两步之后，第一步试验的不确定性是 $H(1/2,1/2)$，第二步试验的不确定性有一半概率是 $H(1)$（上面的分支），有一半概率是 $H(2/3,1/3)$（下面的分支），因而加权的不确定性是 $1/2\cdot 0+1/2\cdot H(2/3,1/3)$. 因此第三个假设可以具体表述为

$$H\left(\frac{1}{2},\frac{1}{3},\frac{1}{6}\right)=H\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right)+\left[\frac{1}{2}\cdot H(1)+\frac{1}{2}\cdot H\left(\frac{2}{3},\frac{1}{3}\right)\right].$$

这里，我们可以看出 Shannon 的哲学思想：不确定性只来自于概率分布而不是具体对象. 他的考虑具有浓厚的工程意味，正如他自己针对通信的数学理论所说：“消息是具有含义的……然而，通信的语义层面并不是工程问题所关心的.”正是因为抽象掉了具体考虑的对象，信息论的应用才变得如此广泛.

基于上面三个假设，Shannon 证明了如下定理，这一定理直接给出了熵的概念.

定理 3.1 (Shannon 定理) *H 满足三个假设当且仅当*

$$H(p)=-C\sum_i p_i\log p_i,$$

其中 C 是正常数，$0\log 0=0$.

这一定理的证明较长并且和后面的讨论关联较小，所以我们在第 3.5 节中给出证明.

根据对数的的换底公式，可以将 $C\log p_i$ 写为 $\log_b p_i$，这里 $C=1/\log b$. 于是，Shannon 定理直接给出了熵的如下定义：

定义 3.1 (熵) 分布列 $p=(p_1,\dots,p_n)$ 的**熵**定义为

$$H(p)=-\sum_{i=1}^{n} p_i\log_b p_i.$$

其中 $b=\mathrm{e}$（自然对数底数），$0\log 0=0$. 当 $b=2$ 时，我们记熵为 $H_2(p)$.

通常来说，使用 e 作为底数会使得数学推导简洁，而用 2 为底数则常常是讨论信息量时的习惯. 在第 3.3 节中，我们将讨论熵在通信中的含义，以 2 为底的时候熵的实际意义会更清楚些. 如果没有特别强调，我们在讨论时总是假设 $b = \mathrm{e}$.

熵的定义还可以用数学期望的形式写出. 假设 X 的分布列是 p，$p(i) = \Pr(X = i)$，那么我们也可以把熵写成期望的形式：

$$H(p) = -\mathbb{E}[\log p(X)].$$

每一个（离散）随机变量 X 会确定一个分布列 p_X，因此我们也可以定义随机变量的熵：

定义 3.2 (随机变量的熵) 随机变量 X 的**熵**定义为

$$H(X) = -\mathbb{E}[\log p_X(X)].$$

其中 p_X 是 X 的分布列，$0 \log 0 = 0$.

尽管从信息论的角度我们可以唯一确定熵的定义，但是熵的概念在物理学上早就已经存在. 下面我们给出统计力学中熵的推导过程.

在经典力学中，物理系统的状态由粒子的位置和动量（也就是速度）完全确定，将粒子位置和动量可能的值集合称为**相空间**，于是物理系统的演化就是相空间中的粒子状态的变化.

将相空间等分成 m 个单元，编号 1 到 m. 假设相空间中有 N 个可区分的粒子，相互独立，没有相互作用，每个粒子等可能出现在每一个单元中. 如果单元 i 中有 N_i 个粒子，那么按照粒子在单元中的分布来看，系统处于某个特定状态的概率为

$$P = \frac{N!}{N_1! \dots N_m!} \left(\frac{1}{m}\right)^N.$$

这是一个多项分布. 两边取对数，得

$$\log P = \log(N!) - \sum_i \log(N_i!) - N \log m.$$

考虑充分大的 N_i，由 Stirling 公式，有

$$\log(N_i!) \sim \log\left(\sqrt{2\pi N_i} \left(\frac{N_i}{\mathrm{e}}\right)^{N_i}\right) \sim N_i \log N_i.$$

因此，

$$\log P \sim N \log N - \sum_i N_i \log N_i - N \log m \sim N \log N - \sum_i N_i \log N_i. \tag{3.1}$$

假设 N_i 充分大的时候，N_i/N 呈现固定的比例 p_i，那么

$$\begin{aligned} N\log N - \sum_i N_i \log N_i &\sim N\log N - \sum_i N p_i \log(N p_i) \\ &= -N\sum_i p_i \log p_i. \end{aligned}$$

$\log P \sim -N\sum_i p_i \log p_i$. 于是我们证明了：

$$\frac{1}{N}\log P \to H(p_1,\ldots,p_m), \quad N\to\infty.$$

因此，熵刻画了充分多粒子的物理系统某种特定状态出现概率！熵越大的系统越有可能达到. 更进一步，在统计力学中有 Boltzmann H-定理：孤立的粒子系统会向着熵（H）增加的方向演化，并最终达到熵最大的状态. H-定理是热力学第二定律的微观解释，熵越大的系统出现概率越大、越混乱、越接近均衡.

§3.1.2 概念与性质

现在，我们将进一步探讨熵的若干拓展定义，并讨论他们的性质.

首先，我们考虑最简单的情形，即分布列为 (p_1,p_2)，此时，我们不妨设 $p_1 = p$，$p_2 = 1-p$，那么熵就是

$$H(p_1,p_2) = H(p,1-p) = -p\log p - (1-p)\log(1-p).$$

H 是关于 p 的函数，作图如图 3.2 所示.

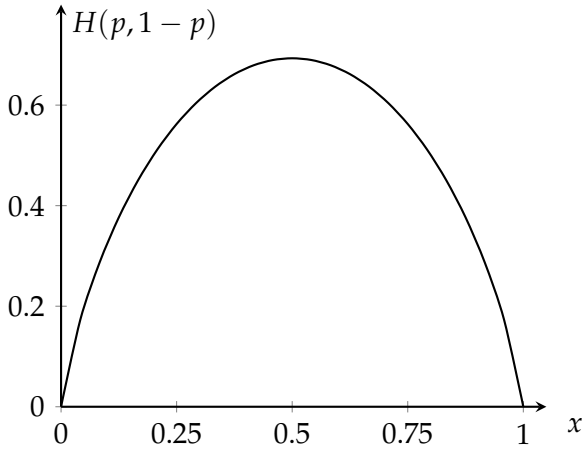


图 3.2: 熵 $H(p)$ 的图像.

利用导数的方法，很容易证明：

命题 3.1 *$H(p)$ 在 $p \in (0,1/2)$ 严格单调递增，在 $p \in (1/2,1)$ 严格单调递减. 它的最小值是 0，在 $p \in \{0,1\}$ 取得；它的最大值是 $\log 2$，在 $p = 1/2$ 取得.*

证明. 我们有

$$H'(p) = -\log p - 1 - \log(1-p) + 1 = \log(p^{-1} - 1),$$

$H'(p)$ 是一个关于 p 单调递减的函数. 我们有如下分类讨论：

- 当 $p \in (0,1/2)$ 时，$p^{-1} - 1 > 1$，所以 $H'(p) > 0$，$H(p)$ 是单调递增的；
- 当 $p \in (1/2,1)$ 时，$p^{-1} - 1 < 1$，所以 $H'(p) < 0$，$H(p)$ 是单调递减的；
- 当 $p = 1/2$ 时，$H'(p) = 0$，结合前两点，$H(p)$ 取得最大值。

$H(0) = H(1) = 0$，$H(1/2) = \log 2$，因此命题得证. □

这与我们对于“不确定性”的直觉是相一致的：当 p 接近 0 或 1 时，我们对于 X 的取值几乎是确定的，因此熵接近 0；当 p 接近 1/2 时，我们对于 X 的取值几乎是完全不确定的，因此熵接近最大值 $\log 2$.

实际上，这样的性质对于一般的分布也是成立的，我们分别将他们写在命题 3.2 和命题 3.4 中.

考虑一般分布的熵 $H(p) = H(p_1, \ldots, p_n)$. 我们有如下性质：

命题 3.2 *$H(p) \geq 0$，等号成立当且仅当某个 $p_i = 1$.*

证明. 这是一个典型的证明，主要的技巧是使用熵的期望形式. 考虑随机变量 X，其分布列为 p. 回忆 Jensen 不等式（定理 C.17）：如果 f 是一个严格凸函数，那么

$$\mathbb{E}[f(X)] \geq f(\mathbb{E}[X]).$$

等号成立当且仅当 X 是常数.

因为 $-\log(\cdot)$ 是严格凸函数，所以根据 Jensen 不等式

$$H(X) = \mathbb{E}[-\log p(X)] \geq -\log \mathbb{E}[p(X)] \geq -\log 1 = 0.$$

等号成立当且仅当 X 是常数，即对某个 i，$p(i) = 1$. □

命题 3.3 *p_i 朝着相等方向改变的时候 H 增加. 也就是说，假设*

$$p_i < p_i' \leq p_j' < p_j, \quad p_i + p_j = p_i' + p_j',$$

那么，用 p_i' 和 p_j' 代替原来的 p_i 和 p_j，H 将会变大.

证明. 为简化符号，考虑 $i=1$ 和 $j=2$，一般情况是一样的证明. 利用假设三，第一步试验中，将试验的结果 1 和结果 2 合并，第二步试验再按照 $p_1/(p_1+p_2)$ 和 $p_2/(p_1+p_2)$ 的概率产生结果 1 和结果 2. 于是，

$$\begin{aligned}
&H(p_1,p_2,\dots)\\
=&H(p_1+p_2,p_3,\dots)+(p_1+p_2)H\left(\frac{p_1}{p_1+p_2},\frac{p_2}{p_1+p_2}\right) \quad \text{(假设三)}\\
\le&H(p_1+p_2,p_3,\dots)+(p_1+p_2)<H\left(\frac{p_1'}{p_1'+p_2'},\frac{p_2'}{p_1'+p_2'}\right) \quad \text{(命题 3.1)}\\
=&H(p_1',p_2',p_3,\dots). \quad \text{(假设三)}
\end{aligned}$$

□

命题 3.4 *当 $p_1=\cdots=p_n=1/n$ 时 H 取得最大值 $\log n$.*

证明. 我们将反复利用命题 3.3，直到所有的 p_i 都相等. 若存在 $p_i\neq p_j$，因为 $\sum_i p_i/n=1/n$，根据鸽巢原理，则必有 i,j 满足

$$p_i<1/n<p_j.$$

根据命题 3.3，我们可以将 p_i 和 p_j 替换为 $1/n$ 和 p_i+p_j-1/n，而 H 增大. 只要还有两个 p_i 不相等，这一过程就可以重复，每一次都会增大 H，直到所有 p_i 都等于 $1/n$. □

至此，命题 3.2 和命题 3.4 证明了一般情形的命题 3.1. 在等可能的时候不确定性最大，熵最大；在确定事件的时候不确定性最小，熵最小. 所以熵是符合直观的定义.

接下来，我们讨论熵的拓展形式.

在一次试验中，我们可以观察多个变量，比如说 X 和 Y. 等价地，我们其实只观察到了一个结果 (X,Y)，只是这个结果是一个向量的形式，服从分布 $p(i,j)$. 因此，这一向量也有对应的熵，这就是**联合分布的熵**：

$$H(X,Y)=-\mathbb{E}[\log p(X,Y)].$$

对应地，我们也可以写成和的形式：

$$H(p)=-\sum_{i,j}p(i,j)\log p(i,j).$$

自然，联合分布也可以引出**边缘分布的熵**：

$$H(X)=-\mathbb{E}[\log p_X(X)]=-\sum_i\sum_j p(i,j)\log\sum_j p(i,j).$$

$$H(Y) = -\mathbb{E}[\log p_Y(Y)] = -\sum_j \sum_i p(i,j) \log \sum_i p(i,j).$$

有了两个随机变量，我们就可以讨论“条件”的概念. 具体来说，我们可以把试验分为两步，第一步观测 X，第二步观测 Y，那么，第二步所产生的熵就是已经知道第一步结果之后的熵，即：

$$H(Y|X=x) = -\mathbb{E}[\log p_{Y|X=x}(Y)|X=x] = -\sum_j p_{Y|X=x}(j) \log p_{Y|X=x}(j),$$

其中 $p_{Y|X=x}(j) = p(x,j)/p_X(x)$. 当我们知道了 $X=x$ 之后，对 Y 的观测就消除了部分的不确定性，因此根据我们对于不确定性和信息关系的讨论，从 $X=x$ 中获得的关于 Y 的信息是

$$I(X=x:Y) = H(Y) - H(Y|X=x).$$

考虑一个特殊情况，$Y=X$，那么刚刚的讨论就变成了自己从自己身上获得的信息，或者说知道 $X=x$ 带来的信息量. 首先有

$$p_{X|X=x}(i) = \begin{cases} 1, & i = x \\ 0, & i \neq x. \end{cases}$$

因此，

$$H(X|X=x) = -\sum_j p_{X|X=x}(j) \log p_{X|X=x}(j) = -1 \log 1 = 0.$$

于是，

$$I(X=x:X) = H(X) - H(X|X=x) = H(X).$$

这正是定量版本的“消除不确定性的东西被称之为信息”! 此外，我们之前说过，熵刻画的是一族可能对象的信息，这一点也反映在了这一公式中：只要知道了 X 的值，无论它具体是多少，我们得到的信息量是一样的！

再回到一般情况，还是同样的两步试验，我们定义给定 X 时 Y 的**条件熵**为

$$\begin{aligned} H(Y|X) =& \mathbb{E}[H(Y|X=x)] \\ =& -\mathbb{E}[\log p_{Y|X}(Y)] \\ =& -\sum_x p_X(x) \sum_j p_{Y|X=x}(j) \log p_{Y|X=x}(j) \\ =& -\sum_{x,j} p(x,j) \log p_{Y|X=x}(j). \end{aligned}$$

换言之，我们现在进一步假定 X 也是不知道的，于是 $H(Y|X)$ 就是平均上来说第二步中 Y 的不确定性. 条件熵和熵有着类似的性质：

命题 3.5 $H(Y|X) \geq 0$，等号成立当且仅当 Y 是退化的，即 Y 概率 1 只取一个值.

证明. 仿照命题 3.2 的证明即可. □

类似地，我们可以考虑平均上 Y 中包含的关于 X 的信息量：

$$\mathbb{E}[I(X = x : Y)] = H(Y) - H(Y|X).$$

与之相对应地，平均上 X 中包含的关于 Y 的信息量为

$$\mathbb{E}[I(Y = y : X)] = H(X) - H(X|Y).$$

一个自然的问题是，二者相互包含的信息量是什么关系？根据概率的链式法则，$p(x,y) = p_{X|Y}(x|y)p_Y(y)$，带入 $H(X,Y)$ 的定义得熵的链式法则：

命题 3.6 对任意离散随机变量 X, Y，$H(X,Y) = H(Y) + H(X|Y)$.

利用链式法则，我们注意到，

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

所以，X 中包含的 Y 的信息和 Y 中包含的 X 的信息是一样多的！

此外，直观上我们还应该觉得，信息量不能是负的，实际上的确如此：

命题 3.7 $H(X) - H(X|Y) \geq 0$，等号成立当且仅当 X 和 Y 相互独立.

我们将在第 3.2 节看到，命题 3.7 就是 K-L 散度信息不等式的一个特例，所以我们就不在这里给出证明了. 命题 3.7 表明知道任何信息都不会增加不确定性，这个原理被称为“Information doesn't hurt.”

根据以上讨论，我们可以自然地定义 X 和 Y 的**互信息**为

$$I(X;Y) = I(Y;X) = \mathbb{E}[I(X = x : Y)] = \mathbb{E}[I(Y = y : X)].$$

类似联合分布的熵，条件熵和互信息的概念也可以推广到多元情形. 对于三个随机变量 X, Y, Z，我们可以定义条件熵为

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

类似地，我们可以定义互信息为

$$I(X,Y;Z) = H(X,Y) - H(X,Y;Z).$$

他们的含义以及性质和二元情形类似.

同样，我们可以定义**条件互信息**为

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

表明 Z 已知时候 Y 给 X 带来的平均信息增益. 类似互信息，我们如下性质：

命题 3.8 *条件互信息满足以下性质：*

1. *非负性：* $I(X;Y|Z) \geq 0$，*等号成立当且仅当* X *和* Y *在给定* Z *的条件下相互独立.*
2. *对称性：* $I(X;Y|Z) = I(Y;X|Z)$.
3. *链式法则：* $I(X,Y;Z) = I(X;Z|Y) + I(Y;Z)$.
4. *条件信息量：* $I(X:X|Y) = H(X|Y) - H(X|X,Y) = H(X|Y)$.

最后一条性质说的其实是，在平均的意义下，给定 Y 的时候，知道 X 所能够得到的额外信息量就是 $H(X|Y)$. 这一命题的证明和前面都非常相似，见习题[lhy: 出一下]。

最后，我们将各种熵以及信息量的关系总结为图 3.3. 在集合论中，这样的图被称为 Venn 图，所以我们可以用集合论来理解信息与熵. 对应关系可以总结为表 3.1.

信息论	集合论
$H(X)$	A
$H(Y)$	B
$H(X\|Y)$	$A \setminus B$
$H(X,Y)$	$A \cup B$
$I(X;Y)$	$A \cap B$

表 3.1: 信息论和集合论的对应关系.

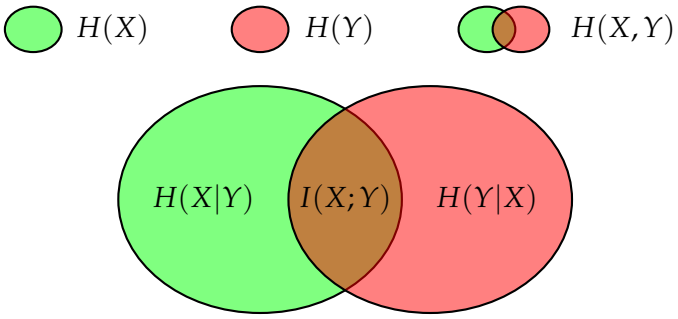


图 3.3: 熵和信息量的关系

§3.2 Kullback-Leibler 散度

§3.2.1 定义

为了引入 K-L 散度，我们从互信息出发. 它的定义是：

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

根据命题 3.7，$I(X;Y)\geq 0$，等号成立当且仅当 X,Y 相互独立，即 $p(x,y)=p_X(x)p_Y(y)$. X,Y 之间的互信息越大，说明他们之间的关联越强，分布越不独立，$p(x,y)$ 越不接近 $p_X(x)p_Y(y)$.

上面的推导说明，互信息其实在用分布列的比值比较两个分布的接近程度，这样的想法可以被推广到一般分布上. 考虑两个概率分布的似然函数p_1 和 p_2（也就是他们的分布列）. 抽取一个样本 X，考虑如下两个假设：

$$H_1\text{：样本 } X \text{ 来自 } p_1 \text{ 的分布} \quad \text{vs.} \quad H_2\text{：样本 } X \text{ 来自 } p_2 \text{ 的分布}$$

为了判断哪个假设是更有可能的，我们考虑两个假设分布的似然比 p_1/p_2. 如果这个比值越大，就越说明 p_1 的值更大，因而更有可能，倾向于接受 H_1，反之则越倾向于接受 H_2. 这种方法被称之为*似然比检验法*.

从上述讨论出发，我们定义区分 H_1 和 H_2 的检验量为*对数似然比*：

$$\log(p_1(x)/p_2(x)).$$

假设 H_1 是真的，那么在 H_1 成立的世界里，这个检验量的期望为

$$\mathbb{E}_{X\sim p_1}(\log(p_1(X)/p_2(X))) = \sum_i p_1(i)\log\frac{p_1(i)}{p_2(i)}.$$

期望越大，说明 H_1 越有可能成立. 实际上，上面的期望就是 K-L 散度的定义.

定义 3.3 (Kullback-Leibler 散度，相对熵) 对于两个概率分布 p_1, p_2，他们的 **Kullback-Leibler 散度**（**相对熵**）定义为

$$D_{\mathrm{KL}}(p_1\|p_2) = \mathbb{E}_{X\sim p_1}(\log(p_1(X)/p_2(X))) = \sum_i p_1(i)\log\frac{p_1(i)}{p_2(i)}.$$

其中规定 $0\log(0/0) = 0$，$0\log(0/a) = 0$，$a\log(a/0) = +\infty$.

我们马上知道，互信息是 K-L 散度的一种特殊情况：

命题 3.9 *对于两个随机变量 X, Y，成立 $I(X;Y) = D_{\mathrm{KL}}(p_{X,Y}\|p_X p_Y)$，其中 $p_{X,Y}$ 是 X, Y 的联合分布列，p_X, p_Y 分别是 X, Y 的边缘分布列.*

K-L 散度可以看成两个分布之间的区分衡量标准，但他不是度量. 一般来说，甚至连对称性都不成立. 例如，设 p_1 和 p_2 都是定义在 $0, 1$ 上的 Bernoulli 分布，参数分别为 $1/2$ 和 $1/4$. 于是

$$D_{\mathrm{KL}}(p_1\|p_2) = \frac{1}{2}\log\frac{1/2}{3/4} + \frac{1}{2}\log\frac{1/2}{1/4} = \frac{1}{2}\log\frac{4}{3}.$$

$$D_{\mathrm{KL}}(p_2\|p_1) = \frac{3}{4}\log\frac{3/4}{1/2} + \frac{1}{4}\log\frac{1/4}{1/2} = \frac{1}{2}\log\frac{3\sqrt{3}}{4}.$$

这两个值是不相等的. 进一步，这个差值甚至可以到任意大（见习题[lhy: 出一下]）.

上面推导 K-L 散度的过程看起来有些捏造，我们将在第 3.3 节中给出一个非常直观的理解方式。现在，我们先接受这个定义，然后看一下 K-L 散度的一些性质.

§3.2.2 两个关于信息的不等式

利用 K-L 散度，我们可以给出两个关于信息的不等式，它们分别是*信息不等式*和*数据处理不等式*.

定理 3.2 (信息不等式) *对于两个概率分布列 p, q，成立 $D_{\mathrm{KL}}(p\|q) \geq 0$，当且仅当 $p = q$ 时取等号.*

证明. 由于 $\log x$ 是凸函数，所以由 Jensen 不等式，我们有

$$D_{\mathrm{KL}}(p\|q) = -\mathbb{E}_{X\sim p}\left[\log\frac{q(X)}{p(X)}\right] \geq -\log\mathbb{E}_{X\sim p}\left[\frac{q(X)}{p(X)}\right] = -\log\sum_i p(i)\cdot\frac{q(i)}{p(i)} = 0.$$

因此，$D_{\mathrm{KL}}(p\|q) \geq 0$，当且仅当 $p = q$ 时取等号. □

信息不等式表明，K-L 散度虽然不是度量，但却是非负的，因而确实可以被作为熵，用来衡量“额外的不确定性”. 此外，命题 3.7 是信息不等式的直接推论. 利用类似的方法，我们可以证明条件互信息的非负性（即命题 3.8 中的第一条）.

接下来我们叙述并证明数据处理不等式.

定理 3.3 (数据处理不等式) *假设随机变量 X, Y, Z 形成了 Markov 链，那么 $I(X;Y) \geq I(X;Z)$. 特别地，对任意函数 f，成立 $I(X;Y) \geq I(X;f(Y))$.*

证明. 根据互信息链式法则，

$$\begin{aligned} I(X;Y,Z) &= I(X;Z) + I(X;Y|Z) \\ &= I(X;Y) + I(X;Z|Y). \end{aligned}$$

根据 Markov 性，条件在 Y 上，X 和 Z 相互独立. 因此，$I(X;Z|Y) = 0$，根据条件互信息的非负性，$I(X;Y|Z) \geq 0$，所以 $I(X;Y) \geq I(X;Z)$.

显然，$X, Y, f(Y)$ 也形成了 Markov 链，所以 $I(X;Y) \geq I(X;f(Y))$. □

数据处理不等式表明，无论我们对随机变量 Y 进行了何种处理，甚至是允许带随机的处理，它的信息量都不会增加.

§3.3 编码理论

最早的时候，Shannon 建立信息论，就是为了给通信和编码理论一个数学基础. 从编码的角度出发，我们可以更本质地理解信息和熵.

§3.3.1 熵与编码

通信就是一个发射端和一个接收端，中间有信道传递消息. 将所有可能要传递的消息集合记为 Ω（一个有限集），我们现在考虑 Ω 所蕴含的信息量是多少. 注意，根据 Shannon 的思想，Ω 里面具体是什么并不重要，重要的是有多少个. 我们可以用自然数 $1, 2, \ldots$ 表示集合 Ω 里的元素.

使用二进制编码，我们至少需要 $\log_2 |\Omega|$ 个比特来表示 Ω 里的元素. 于是，假如说随机变量 X 表示收到的消息，那么 X 的熵就定义为 $H(X) = \log_2 |\Omega|$，它衡量了接收端收到的消息的不确定性.

当我们选定了具体的消息 $m \in \Omega$，X 的不确定性被消除了，于是 $X = a$ 的过程产生了（或者说传递了）$\log_2 |\Omega|$ 比特的信息. 比如说，我们发送一个长为 n 的二进制序列，消息的集合大小就是 2^n，发送任何一条具体的消息，我们就传递了 n 比特的信息.

有时候，我们会把消息看成一个序列. 具体来说，我们可以发送独立的 k 条消息，其中第 i 条 X_i 来自消息集合 Ω_i，$|\Omega_i| = n_i$，那么 $(X_1, \ldots, X_k)$ 的熵就是

$$H(X_1, \ldots, X_k) = \log_2 n_1 + \cdots + \log_2 n_k,$$

它衡量了 k 条消息的不确定性.

在更常见的情况下，每次发送的其实不是一条消息，而是一个字母，所有的字母组成了一个字母表，我们用 $\Sigma = \{x_1, \ldots, x_s\}$ 来表示. 于是，X_i 就是消息的第 i 个字母，于是，一条消息可以写作 $X_1 \ldots X_k$，其中每一个 X_i 都来自 Σ.

我们现在考虑更简单的情形，即每个字母 X_i 其实是同一个随机变量 X 的独立采样. 如果具体知道某一个 x_i 出现的次数，我们其实可以有更高效的传递信息的方式. 比如说，在极端情况下，如果只有 x_1 和 x_2 会出现，那么我们其实只需要 $\log_2 2 = 1$ 比特就足够传递所有消息了：0 表示 x_1，1 表示 x_2.

在一般情况下，考虑 Ω 中只包含长为 k 的消息，并且 x_i 在消息中出现 k_i 次，那么所有可能的消息数量为

$$|\Omega| = N(k) = \frac{k!}{k_1! \cdot \cdots \cdot k_s!}.$$

假定我们需要 $h(\omega)$ 比特来具体确定发的消息是 ω，我们来推导 $h(\omega)$ 的上下界。

- 无论如何编码，我们需要能区分 Ω 中的不同元素，这本身需要 $\log_2 \Omega$ 比特来表示。
- 在一些编码中，我们还需要确定 $(k_1, \ldots, k_s)$. 确定它的一种方式是按照顺序给出每一个 k_i. 因为 $k_i \le k$，每个 k_i 最多需要 $\log_2 k$ 比特来表示，所以按顺序表示所有的 k_i 至多需要 $s \log_2 k$ 比特.

于是，我们需要的比特数为

$$\log_2 \frac{k!}{k_1! \cdot \cdots \cdot k_s!} \le h(m) \le s \log_2 k + \log \frac{k!}{k_1! \cdot \cdots \cdot k_s!}.$$

这刚好和我们在统计力学中推导熵的过程是一致的！假设消息足够的长，x_i 出现的频率逐渐接近 p_i，那么同样的推理我们可以知道，

$$h(m) \sim -k \sum_i p_i \log_2 p_i = k H_2(p_1, \ldots, p_s).$$

因此，如果知道字母的出现频率，我们传递单位长度的消息至少需要 $H(p_1, \ldots, p_s)$ 比特，这完全给出了熵的具体含义，而且，我们现在也不难理解熵的形式为何会出现 log 了：熵就是期望上编码一个字母需要的比特数（即 $\log(1/p(X))$）.

那么，是否有一种编码确实达到了这个理论上的编码长度下界呢？答案是肯定的，它被称为 *Huffmann 编码*. 它的核心思想在于把出现频率高的字母用更短的编码表示. 类似的思想被用在了机器学习的决策树中，作为选择节点非常常用的一种依据.

注. 决策树是一种常用的机器学习分类模型. 假设数据有很多属性 $P_1, \dots, P_k$，这些属性共同决定了某一条数据的类别. 比如，在银行的信用系统中，给定了一个人的性别、是否已婚、是否负债等信息，我们希望给他评估一个信用评级.

决策树的做法是，将决策过程写成一棵树，然后叶节点是决策类别的结果. 比如说，我们会先看这个人是否负债，如果不负债，那么看是否已婚，如果已婚，那么我们信用评级就给 A. 但如果负债，那么我们信用评级就给 B。

那么，每个节点应该判断什么属性呢？树本身其实就是一种广义的消息，沿着树，从根节点走到叶节点得到的就是一条消息. 于是，在这一观点下，我们可以用熵与编码的关系来选择属性。

如果我们选择编码最短的属性，这样我们的决策树就会更加简单. 一种近似的做法是，对于每个节点，都优先选择信息增益最高的属性. 这样的选择方式叫做 *ID3* 策略.

我们进一步的问题是，为什么我们知道了每个字母的频次就可以压缩编码？我们接下来将要说明，其实长为 k 的消息中的“典型消息”的数量远远少于所有 k 长消息的数目，因此我们实际上相当于只是针对一个子集进行编码. 注意到，当 k 充分大的时候，

$$\log_2 N(k) \sim h(m) \sim kH_2(p_1, \dots, p_s).$$

因此，

$$N(k) \approx 2^{kH_2(p_1,\dots,p_s)} = \mathrm{e}^{kH(p_1,\dots,p_s)}.$$

然而，长为 k 的所有消息数目为

$$s^k = \mathrm{e}^{k \log s}.$$

根据命题 3.4，只有当所有 p_i 相等的时候 $N(k)$ 才会达到这一量级. 从这个意义上说，熵所刻画的信息量定量刻画了数据压缩可能的极限.

以上关于信息编码下界以及数据压缩的讨论，再更一般的情况下也成立，此时这样的性质被称为渐近等分性. 而这一性质成立对应的结果被称为 *Shannon–McMillan–Breiman* 定理，它的陈述以及证明都需要用到更多随机过程的知识，这里就不再给出了.

§3.3.2 K-L 散度、交叉熵与编码

我们在 K-L 散度的定义中提到了它的的另一个名字——相对熵. 实际上，这可以从编码中看出来. 假设事实上消息中字母的分布是 p_1，那么期望上编码单位长度消息需要的比特数是

$$H(p_1) = \mathbb{E}_{X \sim p_1}[\log p_1(X)].$$

如果我们错误地认为消息中字母的分布是 p_2 并使用最优编码，那么实际上期望编码单位长度消息需要的比特数是

$$\mathbb{E}_{X\sim p_1}[\log p_2(X)].$$

由于错误的认识所产生的额外编码长度是

$$\mathbb{E}_{X\sim p_1}[\log p_1(X) - \log p_2(X)] = D_{\mathrm{KL}}(p_1\|p_2).$$

根据本节中的讨论，我们知道，额外的编码长度代表的是额外的不确定性，因而这一概念是某种“熵”的概念. 这正是“相对熵”的由来，$D_{\mathrm{KL}}(p_1\|p_2)$ 表示了当我们错误地把 p_1 当成 p_2 时带来的额外的不确定性，或者说额外的信息损失.

在机器学习中，比起讨论 K-L 散度，更加常用的是直接讨论量 $\mathbb{E}_{X\sim p_1}[\log p_2(X)]$. 从机器学习的观点来说，$p_1$ 是真实的分布，而 p_2 是我们所学习到的分布. 根据刚刚的讨论，这个量越小越说明 p_2 接近真实的 p_1，因此这又是一种衡量两个分布之间关系的量，我们称之为交叉熵：

定义 3.4 (交叉熵) 给两个随机变量 X, Y，X 的分布为 p_X，Y 的分布为 p_Y，则 X 的分布 p_X 和 Y 的分布 p_Y 的**交叉熵**[1]为

$$CH(p_X, p_Y) = -\mathbb{E}_{X\sim p_X}[\log p_Y(X)] = -\sum_i p_X(i)\log p_Y(i).$$

在机器学习的分类问题中，我们希望学习到的分布 p_Y 尽可能地接近真实的分布 p_X，所以我们训练的目标经常是最小化交叉熵 $CH(p_X, p_Y)$. 有趣的是，从数理统计的角度来看，最小化交叉熵等价于进行最大似然估计（见习题[lhy: 出一下]），因此这为最大似然估计提供了一种信息论意义下的理解.

注. 现代的主流信息论都是从 Shannon 发展起来的. 然而，这一信息论也有很多问题.

- 信息论使用了概率论进行建模. 但我们已经看到，概率要么是作为频率的近似理论（频率学派），要么反映了人们对未知的信念（Bayes 学派）. 无论哪种解释，都将问题简化了. 正如 Kolmogorov 所说：“如果事情没有按照我们的预期发展，那么问题一定出在我们对于概率和真实世界的随机之间关系不清晰的认识上.”
- 这一信息论考虑的是一族对象的信息. 我们是否能够用这样的方式来衡量单个对象的信息量呢？比如，我们要考虑这本书中包含的信息量，是它放在所有可能的书的集合中去考虑呢，还是把它的每一个章节分开考虑成一个随机序列呢？因此，信息论并不能很好地回答“单个对象”的信息量的问题.

现代概率论的奠基人 Kolmogorov 也非常严肃地考虑了这一问题. 他提出了被后世称为

[1]文献中，经常会直接写为 $H(p_X, p_Y)$，但是在本书中为了区分熵，我们使用了符号 CH.

Kolmogorov 复杂度的概念，旨在刻画一个随机字符串的随机程度. 简单来说，一个字符串的 Kolmogorov 复杂度就是描述输出它所需要的最短代码长度。越随机的字符串就越需要更复杂的程序去描述它的输出方式.

例如，尽管字符串 $x = 0101010101$ 看起来非常长，但是我们可以用一个很短的程序来描述它：输出 5 次“01”。然而，尽管字符串 $y = 011001$ 比 x 短得多，我们却很难找到一个简短的程序来描述它. 因此，y 的 Kolmogorov 复杂度要比 x 大，因而看起来更像是随机的.

利用这一概念，我们可以将信息的概念变成一个对象自己的属性，而不再需要把对象放在可能的一堆对象中去考虑. 这是信息论的另一种构建思路.

§3.4 在机器学习中的应用：语言生成模型

现如今，机器学习中最为瞩目的成果之一就是*大语言模型*（LLM），它通过学习人类海量的高质量语料库来形成一个生成式的模型，其中最为典型的例子是 ChatGPT.

从思路上来说，大语言模型的核心思想非常简单：给一段话，将其中一些词掩盖掉，让模型填出这些词来. 例如，给出

“我在[mask]面条，它真好吃。”

模型应该能够填出

“我在吃面条，它真好吃。”

对于 GPT 模型来说，这一思想更加简单：永远只预测下一个词。它的哲学是“通过预测下一个词，可以理解世界.”

这样的思想，对于更一般的数据也是成立的：用（修改过的）数据本身作为输入，训练一个*编码器*，然后将编码器的输出送入*解码器*，而解码器的输出具有原始数据的格式，我们希望这一输出能够尽量匹配原始的输入. 这正是本章开头 Simon 所说的“信息处理器”的具体实现。

在语言模型中，一个*生成模型*往往同时有编码器和解码器. 比如说，图 3.4 展示的就是 BART [LLG+19] 的结构.

有的时候，编码器和解码器并不是显式给出的。例如，GPT 模型只有自回归解码器，没有编码器. 然而，我们可以认为 GPT 的解码器实际上是一个编码器-解码器的结构：它总要处理输入的数据，因而需要编码器，同时也要输出数据，因而需要解码器。

在第 3.3 节我们指出，熵和编码有着密切的联系. 从这个角度出发，我们很容易理解生成模型背后的思想：我们希望通过训练的方式得到一个由神经网络所表示的编码和解码规则，他要尽可能符合真实数据的分布.

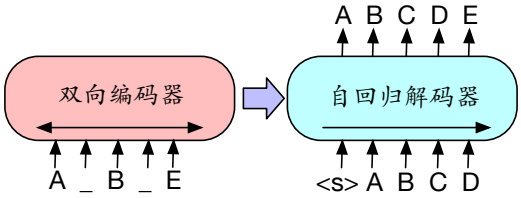


图 3.4: 生成式语言模型 BART 的示意图.

我们可以用一种非常简单的模型去理解这一过程. 假设所有的单词的集合为 Σ，单词数为 k 的文本集合为 Ω. 我们希望训练一个生成模型 M，给它输入 $k-1$ 个单词，它可以给出第 k 个单词的概率分布，我们选择出现概率最大的那个词作为预测.

在训练的时候，对于一个句子 ω，我们只保留前 $k-1$ 个词，得到 $\omega[1:k-1]$，然后将它输入到生成模型 M 中，让它去预测第 k 个词.

对于这一个具体的句子 ω 来说，理想的分布应该是一个 *Dirac 分布*[2] $\delta_{\omega[k]}$，即以概率 1 取到 $\omega[k]$. 假如说生成模型的输出是一个概率分布 $M(\omega[1:k-1]) = p$，那么，我们可以用 K-L 散度去衡量这两个分布的差异.

因为 $H(\delta_{\omega[k]})$ 是固定的，所以我们只用考虑交叉熵$CH(\delta_{\omega[k]}, p)$. 一次训练会给多个样本，所以我们的目标是同时最小化这些交叉熵的和. 假如训练集是 T，我们的目标就是

$$\min_{M} \sum_{\omega \in T} CH(\delta_{\omega[k]}, M(\omega[1:k-1])).$$

实际上，这个例子是有普适性的，所有的监督训练的分类问题都可以用这种方式来建模. 而在第 6.1 节我们也会看到，此时交叉熵实际上被作为了一种*损失函数*.

§3.5 附录：Shannon 定理的证明

我们在这一部分给出 Shannon 定理（定理 3.1）的证明. 整体上的思路是：

1. 证明如果 f 是单调函数，对正整数 m, n 成立 $f(mn) = f(m) + f(n)$，那么 $f(n) = C \log n$.
2. 求出 $H(1/n, \ldots, 1/n)$ 的表达式.
3. 假设 p_i 是有理数，设 $p_i = n_i / \sum_j n_j$，考虑 $\sum_j n_j$ 个等可能试验结果，利用假设 3 推出 H 的表达式.

[2]Dirac 分布是一个数学物理中更加常用的名字. 在概率论中，这也被称为*退化分布*；而在机器学习中，分布经常会表示为一个概率向量，文献中称为*独热向量*.

4. 利用有理数的稠密性和 H 的连续性推出一般情形.

最后一步是显然的，我们只需要证明前三步即可.

对第一步，我们需要证明的是，如果 f 是单调函数，对正整数 m,n 成立 $f(mn) = f(m)+f(n)$，那么 $f(n) = C\log n$. 首先，利用数学归纳法容易看出，对正整数 n,k，成立

$$f(n^k) = kf(n). \tag{3.2}$$

设 m,n 是任意两个大于 1 的整数，再选任意大的正整数 k，从 m 进制数的性质可以看出，总存在正整数 l 使得

$$m^l \le n^k < m^{l+1}. \tag{3.3}$$

根据 f 的单调性，我们有

$$f(m^l) \le f(n^k) < f(m^{l+1}).$$

利用式 (3.2)，我们有

$$lf(m) \le kf(n) < (l+1)f(m) \iff \frac{l}{k} \le \frac{f(n)}{f(m)} < \frac{l+1}{k}.$$

将式 (3.3) 取对数，得到

$$l\log m \le k\log n < (l+1)\log m \iff \frac{l}{k} \le \frac{\log n}{\log m} < \frac{l+1}{k}.$$

所以

$$\left|\frac{\log n}{\log m} - \frac{f(n)}{f(m)}\right| \le \frac{1}{k}.$$

因为 k 可以是任意大的正整数，取 $k\to\infty$，我们就得到了

$$\frac{\log n}{\log m} = \frac{f(n)}{f(m)}.$$

由 m,n 的任意性，取 $m=2$，我们就得到了 $f(n) = (f(2)/\log 2)\cdot\log n = C\log n$. 容易检验，$f(1) = 0 = C\log 1$，因此这一等式对所有正整数 n 都成立.

对第二步，我们需要求出 $f(n) = H(1/n,\dots,1/n)$ 的表达式. 我们要利用第一步的结果，首先，根据假设二，$f(n)$ 是单调递增的函数. 然后，考虑 mn 个等可能试验，我们可以将它分成两步试验，第一步有 m 中等可能的结果，而在每一种结果之下，第二步有 n 种等可能结果. 根据假设三，

$$f(mn) = f(m) + \frac{1}{n}\cdot nf(n) = f(m)+f(n).$$

所以 $f(n)$ 符合第一步的假设. 第二步就可以直接从第一步推出.

最后，我们证明第三步. 设 $p_1,\dots,p_n$ 都是有理数，那么，他们可以被写为

$$p_i=\frac{n_i}{\sum_{j=1}^n n_j}.$$

其中 n_i 是非负整数. 我们考虑 $\sum_j n_j$ 个等可能试验，这个试验可以被看成两步的试验，第一步有 n 种可能的结果，第 i 种结果出现的概率是 p_i，而在第 i 种结果之下，第二步有 n_i 种等可能的结果. 根据假设三，和证明的第三步，我们有

$$C\log\sum_{j=1}^n n_j=H(p_1+\cdots+p_n)+\sum_{i=1}^n p_i\cdot C\log n_i.$$

因此，

$$\begin{aligned}H(p_1,\dots,p_n)&=C\left(\log\sum_{j=1}^n n_j-\sum_{i=1}^n p_i\log n_i\right)\\&=C\left(\log\sum_{j=1}^n n_j-\sum_{i=1}^n p_i\log\left(p_i\sum_{j=1}^n n_j\right)\right)\\&=C\left(\log\sum_{j=1}^n n_j-\sum_{i=1}^n p_i\log p_i-\sum_{i=1}^n p_i\log\sum_{j=1}^n n_j\right)\\&=-C\sum_{i=1}^n p_i\log p_i.\end{aligned}$$

这正是我们要证明的. 于是，我们证明了 Shannon 定理.

§3.6 习题

1. 我们在熵以及 K-L 散度的定义中，都规定了一些无定义的量的值，这些值并不是随便规定的，他们实际上反映了熵或者 K-L 散度定义中的连续性.

(1) 证明：对给定的 $a>0$，$\lim_{x\to0+}x\log(x/a)=0$，因此我们规定了 $0\log0=0$ 以及 $0\log(0/a)=0$.

(2) 证明：对给定的 $a>0$，$\lim_{x\to0+}x\log(a/x)=+\infty$，因此我们规定了 $0\log(a/0)=+\infty$.

2. 考虑关于 n 的正实数序列 $a_1(n),\dots,a_k(n)$ 以及 $b_1(n),\dots,b_k(n)$，假设对所有 i，都成立 $\lim_{n\to\infty}a_i(n)/b_i(n)=1$，证明：

$$\lim_{n\to\infty}\frac{a_1(n)+\cdots+a_k(n)}{b_1(n)+\cdots+b_k(n)}=1.$$

由此证明式 (3.1).

3. 证明命题 3.1.

4. 用 Lagrange 乘子法重新证明命题 3.4.

   提示：如果你不知道 *Lagrange* 乘子法，可以参考 **??**.

5. 证明命题 3.8.

6. [Tin62] 仿照集合论的思路，我们可以定义三个随机变量的互信息为：

$$I(X;Y;Z) = I(X;Y) - I(X;Y|Z).$$

   (1) 证明对称性：$I(X;Y;Z) = I(Y;X;Z) = I(X;Z;Y)$.

   (2) 举一个例子说明，可能会有 $I(X;Y;Z) < 0$，所以这样定义的互信息并不一定真的代表“信息量”.

7. 举一个例子说明，即便 $D_{\mathrm{KL}}(p_1\|p_2)$ 很接近 0，$D_{\mathrm{KL}}(p_2\|p_1)$ 也可能会很大.

8. （单变量数据处理不等式）对任意离散随机变量 X 和函数 f，证明：$H(X) \geq H(f(X))$.

9. 考虑二分类的学习问题，此时对单个样本我们观察到的结果要么是 0 或 1，假设在真实世界中样本总体服从参数为 θ 的 Bernoulli 分布，即 $\Pr(X=1) = 1 - \Pr(X=0) = \theta$. 假设我们的数据集是 $(x_1,y_1),\ldots,(x_N,y_N)$，他们是从总体中独立采样得到的.

   (1) 将问题考虑成一个数理统计问题，估计 θ. 写出似然函数 $L(\theta;y_1,\ldots,y_N)$.

   (2) 再将问题考虑为一个信息论问题，写出每个样本的真实分布与估计分布之间的交叉熵之和 $CH(\theta;y_1,\ldots,y_N)$.

   (3) 证明：$\max_\theta L(\theta;y_1,\ldots,y_N) = \min_\theta CH(\theta;y_1,\ldots,y_N)$，也就是说，最大似然估计等价于最小化交叉熵.

10. 请查找文献回答以下问题：

   (1) Fisher 信息量是什么？它与 K-L 散度有什么样的关系？

   (2) 列举其他概率分布之间散度的概念，他们是否是度量？

   (3) 列举概率分布之间的度量，他们之间是否有关联？

§3.7 章末注记

信息一词的英文是“information”，从动词“inform”来，意思是告知、通知. 早在 15 世纪中叶，“information”一词的出现了义项“在通信中针对特定主题的知识”.[Inf] 这说明在那个时候人类就已经意识到，通信会产生新的东西，被称为知识或信息. 然而，人类对信息的严谨探索起步晚得多. 关于信息的物理学讨论源自统计力学，Boltzmann 提出了著名的熵，证明了 H 定理，以此给出了热力学第二定律的微观解释. 关于 Boltzmann 的工作，参见 [Uff22].

一般认为，现代信息论的起源是 Shannon 的论文 [Sha48]，他在论文中提出了信息的数学定义，以及信息的基本性质. 但是，Shannon 的工作并不是孤立的，他的工作是在统计力学的基础上发展起来的. 事实上，Shannon 在论文中也提到了 Boltzmann 的熵. 这篇工作也被视为通信理论以及编码理论的奠基性工作. Shannon 在这篇论文中还给出了渐近意义下达到理论下界的最优编码，并且独立地被 Fano [Rob49] 以一种不同的形式发现，因此后世称为 Shannon-Fano 编码. 但是 Shannon-Fano 编码并不是精确地达到下界，实际上，最优编码是 Huffman [Huf52] 给出的. Shannon 在这篇论文中还讨论了渐近等分性，后来 MciMillan 的工作 [McM53] 和 Breiman 的工作 [Bre57] 拓展了这一结果，因此后世称为 Shannon-McMillan-Breiman 定理.

关于信息论与集合论的关系工作，可以参见 Hu Kuo Ting 的工作 [Tin62]. 他的工作还给出了多个随机变量互信息的定义，在这一章习题中有涉及.

相对熵的概念依然是从 Shannon 的奠基性论文 [Sha48] 中提出的，但他只局限于通信的问题. 更加一般的讨论是由 Kullback 和 Leibler 在 [KL51] 给出，他们的是一种数理统计的思路，但是他们也具体地讨论了这一概念与信息的关系. 他们的论文中也讨论了交叉熵这一概念.

机器学习中编码器和解码器的思路，最早是由 Rumelhart，Hinton 和 Williams 在 [RHW86] 中提出，他们将编码器和解码器的整体称作*自编码器*. 这篇工作几乎可以被视为深度学习的开山之作，它还提出了训练神经网络最常用的反向传播算法.

关于信息论的经典教科书，可以参见 [CT12] ，此外，概率论的教材中也有很多很好的讨论，比如 [Jay02]，[Shi96] 以及 [李 10].

关于 Kolmogorov 复杂度的讨论，可以参见专著 [?]，这本书对于随机、信息、编码、复杂度，乃至归纳推理等概念都有非常独到的见解，值得一读.

第四章　高维几何，Johnson-Lindenstrauss 引理

作为生活在三维空间中的人，一个令我们倍感着迷的问题是：如果我们的世界是四维、五维甚至更高维的，我们会看到什么样的景象？Christopher Nolan 导演的电影《星际穿越》（Interstellar）给出了一个美妙的想象。

在近未来的地球上，资源匮乏和环境恶化使人类濒临灭绝。为了寻找新的生存空间，一群科学家和宇航员开始了一次前所未有的宇宙冒险。他们的目标是穿越一个神秘的虫洞，探索另一片星系中的适居行星。

然而，当主人公 Cooper 和他的团队成功穿越虫洞时，他们发现自己面对的并不仅仅是遥远的星系，还有更加不可思议的挑战。在探索的过程中，Cooper 最终进入了一个被称为 tesseract 的空间——一个超越我们三维世界的五维空间。在这个空间中，时间变得像空间一样可以自由导航，过去和未来不再是固定不变的线性进程，而是可以被观察和影响的维度。

通过操控时间维度，库珀能够在这个超立方体般的结构中，跨越时间的界限，影响他女儿 Murph 的命运，从而拯救全人类。这一情节不仅带给观众震撼的视觉体验，也揭示了一个深刻的物理与几何真理：在高维空间中，我们的直觉常常失效，必须依赖数学工具来理解和探索这些新维度的性质。

高维空间不仅是科学幻想中的概念，也是现实中的客观存在：当我们描述一个人的时候，我们会考虑他的年龄、身高、体重、学历、职业等多个属性，这些属性构成了一个多维的空间。在这个空间中，每个人都是一个点，而这些点之间的距离和关系，构成了我们对这个人的认知和理解。

在计算机的世界中，世界的一切都被表示为了数据，而且往往是高维数据。因此，如何理解和处理高维数据已经成为人工智能领域的一个重要问题。

本章将说明，高维空间有着令人着迷却看似矛盾的两种性质。首先，与我们生活的三维空间相比，高维空间是极其反直觉的，这带来了望而生畏的复杂性，似乎“维数灾难”

难以逾越。然而，硬币的另一面是，高维空间中的随机数据几乎都是高度集中，因而他们其实可以被压缩到更低维度的空间中进行处理。这一原理被广泛应用在机器学习中。

从技术上看，我们要证明 Johnson-Lindenstrauss 引理，它表明了高维随机变量的集中性. 证明这一引理所用到的概率论技术是**矩法**，这是机器学习理论中最为核心的几个技术之一. 因此本章也可以看做机器学习理论的一个引论.

§4.1 高维几何

§4.1.1 高维球体

首先，我们探讨高维空间中“球体”的特殊性。按照微积分的方式（见附录 C.1.1），我们可以定义 n 维空间中的体积和表面积。定义

$$B_n = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\| \leq 1\}.$$

这是一个 n 维空间中的单位球体.

第一个反直觉的事实是，随着 n 趋于无穷，B_n 的体积和表面积都会趋于零！首先，我们给出 n 维单位球体的体积和表面积的计算公式：

定理 4.1 *记 V_n 为 n 维单位球体的体积，S_n 为 n 维单位球体的表面积。那么，*

$$V_n = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(1+n/2)},$$
$$S_n = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)}.$$

其中 Γ 是 Gamma 函数，对自然数 n，它定义为

$$\Gamma\left(\frac{n}{2}\right) = \begin{cases} (m-1)!, & n = 2m, \\ \frac{(2m)!}{4^m m!}\sqrt{\pi}, & n = 2m+1. \end{cases}$$

这一定理的证明对积分的技巧要求较高，我们这里不给出，感兴趣的读者见习题[lhy: 出一下]。

这一定理的推论是，随着 n 的增大，V_n 和 S_n 都会趋于零：

推论 4.1

$$\lim_{n\to\infty} V_n = 0,$$
$$\lim_{n\to\infty} S_n = 0.$$

证明. 当 n 趋于无穷时，由 Stirling 公式，我们有

$$\Gamma(n) \sim \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n.$$

因此，当 $n \to \infty$，

$$V_n \sim \frac{\pi^{n/2}}{\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}}\left(\frac{e}{n\sqrt{\pi}}\right)^n \to 0.$$

同理，S_n 的极限也为 0. □

接下来，我们说明，高维空间中的球体质量分布是极其不均匀的，大部分质量都集中在球体的边界上。定义一个半径为 r 的 n 维球为

$$B_n(r) = \{x \in \mathbb{R}^n : \|x\| \le r\}.$$

那么我们有：

命题 4.1 *对任意 $\epsilon \in (0,1)$，*

$$\frac{\lambda(B_n(1-\epsilon))}{\lambda(B_n(1))} = (1-\epsilon)^n.$$

其中 λ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的 Lebesgue 测度（体积）。

因此，当 n 趋于无穷时，这一比值以指数速度趋于零。

证明. 利用体积（Lebesgue 测度）的性质（见附录 C.1.1），

$$\lambda(B_n(r)) = r^n \lambda(B_n(1)).$$

代入 $r = 1-\epsilon$，即可得证. □

接下来，我们再说明，如果把 n 维球和 n 维超立方体放在一起看，他们的质量分布也是非常反直觉的。对于 $n \in \mathbb{N}$，$\epsilon > 0$，定义我们定义一个 n 维的“球壳”$A_{n,\epsilon}$：

$$A_{n,\epsilon} = \{x \in \mathbb{R}^n : (1-\epsilon)\sqrt{n/3} < \|x\| < (1+\epsilon)\sqrt{n/3}\}.$$

这是一个半径为 $\sqrt{n/3}$ 的 n 维“球壳”，厚度为 2ϵ。

我们有如下定理：

定理 4.2

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\lambda(A_{n,\epsilon} \cap (-1,1)^n)}{\lambda((-1,1)^n)} = 1,$$

其中 λ 是 $\mathbb{R}^n$ 上的 Lebesgue 测度（体积）。

我们来解释这一定理反直觉的地方。

- 如果我们只看方向 $(1,0,\ldots,0)$（或者其他“正方向”），半径为 $\sqrt{n/3}$ 的球壳应该远远超出了 $(-1,1)$ 的范围。然而，这一定理告诉我们，球壳在超立方体内占据了几乎全部的体积，这说明在其他的方向，球体以不可思议的方式被“压扁”了。
- 当 n 很大时，超立方体 $(-1,1)^n$ 的绝大部分体积都是由一个厚度为 ϵ，半径为 $\sqrt{n/3}$ 的 n 维球壳提供的，当 ϵ 很小时，这个球壳非常薄。一层薄球壳占据了一个实心立方体的绝大部分体积，这个在二维和三维空间中也是难以想象的。

接下来，我们证明这一定理。

证明. 为了证明这一定理，我们可以考虑 n 维随机变量的分布。

设 $X_1, X_2, \ldots, X_n$ 是独立同分布（i.i.d.）的随机变量，且服从均匀分布 $\mathcal{U}(-1,1)$。$Z_n = (X_1, X_2, \ldots, X_n)$ 服从均匀分布 $\mathcal{U}((-1,1)^n)$。对任意集合 $A \subseteq \mathbb{R}^n$，有

$$\Pr(Z_n \in A) = \frac{\lambda(A \cap (-1,1)^n)}{\lambda((-1,1)^n)}.$$

我们来计算 $\Pr(Z_n \in A_{n,\epsilon})$。

$Y_i = X_i^2$ 也是 i.i.d. 的，并且有

$$\mathbb{E}[Y_i] = \int_{-1}^{1} \frac{1}{2} \cdot x^2 \mathrm{d}x = \frac{1}{3}.$$

因为 $\mathsf{Var}[Y_i] \le \mathbb{E}[Y_i^2] \le 1$，由弱大数定律，$\sum_{i=1}^n X_i^2 / n$ 偏离期望 $1/3$ 某个值的概率会随着 n 趋于无穷而趋于零。更精确来说，当 $n \to \infty$ 时，

$$\Pr\left[\left|\frac{\sum_{i=1}^n X_i^2}{n} - \frac{1}{3}\right| > \epsilon\right] \to 0.$$

变形得

$$\underbrace{\Pr\left[(1-\epsilon)\sqrt{\frac{n}{3}} \le \sqrt{\sum_{i=1}^n X_i^2} \le (1+\epsilon)\sqrt{\frac{n}{3}}\right]}_{=\Pr[Z_n \in A_{n,\epsilon}]} \to 1.$$

于是，

$$\frac{\lambda(A_{n,\epsilon} \cap (-1,1)^n)}{\lambda((-1,1)^n)} = \Pr\left[Z_n \in A_{n,\epsilon}\right] \to 1.$$

这就完成了证明。 □

§4.1.2 Stein 悖论

接下来，我们转向更加抽象的高维空间，先考虑一维空间。假设 $X_1 \sim \mathcal{N}(\mu, 1)$，但我们并不知道 μ 是什么。通过随机采样得到了一个样本 $x_1 = 7$，怎样合理地估计 μ？既然没有多余的信息，我们不妨就猜 $\hat{\mu} = 7$，这是一个符合直觉的估计。

然后转向二维空间，假设 $(X_1, X_2) \sim \mathcal{N}(\mu, \mathbf{1}_2), \mu = (\mu_1, \mu_2)$，我们还是不知道 μ 是什么。同样，随机采样得到样本 $x_1 = 7, x_2 = 6$，怎样合理地估计 μ？我们似乎依然没有多余的选择，$\hat{\mu}_1 = 7, \hat{\mu}_2 = 6$ 看起来也是一个“好的”估计。

现在，转向一般的 n 维空间，$n \geq 3$. 假设

$$(X_1, X_2, \ldots, X_n) \sim \mathcal{N}(\mu, \mathbf{1}_n), \quad \mu = (\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n),$$

μ 未知。随机采样得到样本 $x_1, x_2, \ldots, x_n$，怎样对 μ 进行估计?

直观上看，这似乎与一维、二维空间的情况并无区别。我们除了直接取

$$\hat{\mu} = (x_1, x_2, \ldots, x_n), \tag{4.1}$$

似乎没有更好的选择，我们把这种估计称为*朴素估计*。然而，在这部分我们将看到，在高维空间中，存在比朴素估计更好的估计方法！这就是 *Stein 悖论*。

为了衡量一个估计量方法的优劣程度，可以定义损失函数（均方误差）:

$$\ell = \mathbb{E}\left[\|\hat{\mu} - \mu\|^2\right].$$

均方误差越小，我们认为估计量越好。

然而，好坏这件事情似乎并没有那么简单，在一维的情况下，考虑如下估计量:

1. 一个估计量 $\hat{\mu}_1$ 是令 μ 等于得到的样本点，那么

$$\mathbb{E}\left[\|\hat{\mu}_1 - \mu\|^2\right] = \mathbb{E}\left[(x - \mu)^2\right] = \mathsf{Var}[x] = 1.$$

2. 另一个估计量 $\hat{\mu}_2$ 是令 μ 等于一个固定的值，比如 $\mu = 7$，那么

$$\mathbb{E}\left[\|\hat{\mu}_2 - \mu\|^2\right] = \mathbb{E}\left[(7 - \mu)^2\right] = (7 - \mu)^2.$$

我们不能明确说明哪一种估计量更好，因为如果 μ 在 7 附近，第二种方法会更好；但是如果 μ 在 0 附近，第一种方法会更好。

上面的例子表明，如果一个模型的参数 μ，我们很可能无法判断哪一种方法更好。但有一种情况，我们是可以明确说明一个方法 A 一定不好：有另外一个估计量在任何 μ 下都比它好。这就是如下定义:

定义 4.1 (可接受性) 考虑对参数 μ 的估计量方法 A，如果存在估计量方法 B，在任意的 μ 下都成立

$$\ell_B > \ell_A,$$

我们就称 A 方法是**不可接受的**。否则，我们称 A 方法是**可接受的**。

有了评判估计量好坏的标准，我们就可以引入 James-Stein 估计量了。

定义 4.2 (James-Stein 估计量) 假设采样得到的数据点是 $x_1, x_2, \ldots, x_n$，对参数

$$\mu = (\mu_1, \mu_2, \ldots, \mu_n)^\mathsf{T},$$

定义 **James-Stein 估计量**为：

$$\hat{\mu} = \left(1 - \frac{n-2}{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}\right) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}. \tag{4.2}$$

定理 4.3 (Stein 悖论) *对于 $n \geq 3$，朴素估计 (4.1) 是不可接受的，具体来说，James-Stein 估计量 (4.2) 在任意 μ 下都比朴素估计更好。*

这一定理的证明十分具有技巧性，我们这里不给出证明，感兴趣的读者参阅第 4.5 节。

比起证明这个定理，更重要的问题是，为什么 James-Stein 估计量会比朴素估计更好？答案正是在于高维空间的反直觉性。

如图 4.1 所示，坐标轴上有一个圆心为 c 的单位圆，圆内随机选取一个点 x，那么

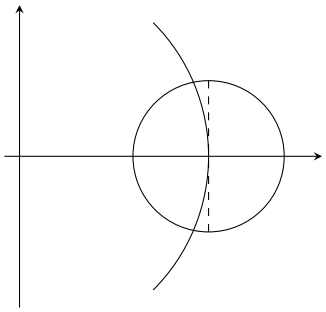
$$\Pr(\|x\| > \|c\|) > \frac{1}{2}.$$

如果不是二维的圆而是高维的球，这一不等式依然成立，并且这种效应随维数的增加而变强（见习题[lhy: 出一下]）。另一方面，圆心 c 离中心越远，这一概率越接近 $1/2$。

现在，我们回到最早的估计问题，我们把 μ 看作是圆心 c，而随机采样的点就看作是样本点。上面的概率不等式意味着，随着维数变高，朴素估计量 x 与真正的 μ 之间的的差距会越来越大。不仅如此，朴素估计量对 μ 的估计会偏大。

直觉上，要想更加精确估计 μ，我们需要比样本点 x 更接近圆心 c。仔细观察 (4.2)，James-Stein 估计量的确是这样做的。下面，我们详细介绍这一估计量的几何推导。

由于坐标系的选取是随意的，可以设一条坐标轴和 μ 的方向相同，其他 $n-2$ 根坐标轴方向随意，但正交。在新坐标系下，$\mu = (\|\mu\|, 0, \ldots, 0)^\mathsf{T}$。



[lhy: 重画]

图 4.1: 高维空间中的采样点

设样本是 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^\mathsf{T}$。损失函数可以被分解成两个部分的和：

$$\ell = (x_1 - \|\mu\|)^2 + \sum_{i=2}^{n} x_i^2. \tag{4.3}$$

令

$$\rho = \sqrt{\sum_{i=2}^{n} x_i^2}.$$

因为 x 是分量相互独立的 Gauss 向量，坐标轴旋转不改变分量之间的独立性，因此 ρ 服从自由度为 $n-1$ 的 χ 分布（可参见附录 C.4）。

假设样本点恰好满足 $x_1 = \|\mu\|$，而 x_i 以概率 1 都不为 0，可以画出图 4.2。

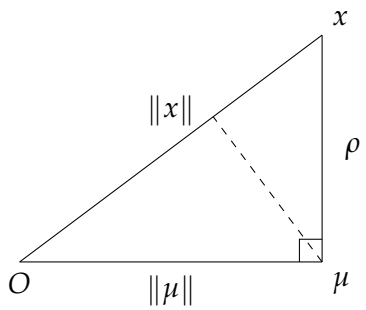


图 4.2: x 与 μ 形成的直角三角形

如果我们直接用样本点 x 作为估计量 $\hat{\mu}$，那么我们产生的偏差在于直边上，因此会有 ρ^2 的损失。现在，我们尝试移动 $\hat{\mu}$，来减少损失。

我们除了样本点 x 和原点 O 之外，其他任何信息都没有。因此，盲目的移动反而会带来更大的损失。结合前面的讨论，我们想要将 $\hat{\mu}$ 靠近原点，因此，一个合理的办法就是沿着斜边 Ox 向原点移动。

根据直角三角形的性质，当 $\hat{\mu}-\mu$ 与斜边垂直的时候，损失最小。我们来推导 $\hat{\mu}$ 的表达式。设 $\hat{\mu}=\alpha x$。根据三角形相似的原理，我们有

$$\begin{aligned}
&\frac{|O\hat{\mu}|}{|O\mu|}=\frac{|O\mu|}{|Ox|},\\
\iff &\frac{\alpha\|x\|}{\|\mu\|}=\frac{\|\mu\|}{\|x\|}\\
\iff &\alpha=\frac{\|\mu\|^2}{\|x\|^2}=1-\frac{\rho^2}{\|x\|^2}.
\end{aligned}$$

因此，新的估计量是

$$\hat{\mu}=\left(1-\frac{\rho^2}{\|x\|^2}\right)x=\left(1-\frac{\rho^2}{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}\right)x.$$

然而，这一新估计量是不可计算的：因为我们只知道 O 和旋转之前的 x，所以我们没有办法计算 ρ. 为了得到 James-Stein 估计量，我们用一些数字特征来代替 ρ。对于自由度为 $k>1$ 的 χ 分布，其众数是 $\sqrt{k-1}$（见习题[lhy: 出一下]）。用众数来代替 ρ，就得到了 James-Stein 估计量。

最后，我们给出一些关于 Stein 悖论的讨论。

- 存在比 James-Stein 估计量更好的估计量。直观上，当样本 x 过于靠近原点的时候，$\|x\|$ 接近零，因此 James-Stein 估计量会穿过原点，往反方向跑到很远地方。这自然会带来很大的损失。因此，修正这一行为可以得到更好的估计量，比如

  $$\hat{\mu}=\mathsf{ReLU}\left(1-\frac{n-2}{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}\right)x,$$

  其中

  $$\mathsf{ReLU}(x)=\begin{cases}x, & x>0,\\ 0, & x\le 0.\end{cases}$$

- 我们也可以从偏差-方差权衡的角度来理解 James-Stein 估计量。“距离”这一概念，在代数上，可以做如下分解：

  $$\begin{aligned}
  \mathbb{E}\left[(\hat{\mu}-\mu)^2\right]&=\mathsf{Var}\left[\hat{\mu}-\mu\right]+\left(\mathbb{E}\left[\hat{\mu}-\mu\right]\right)^2\\
  &=\mathsf{Var}[\hat{\mu}]+\left(\mathbb{E}\left[\hat{\mu}-\mu\right]\right)^2.
  \end{aligned}$$

  前半部分是方差（距离差的平方的期望），后半部分是偏差（距离差的期望的平方）。朴素估计是无偏差估计，但会引入很大的方差。通过适当引入偏差可能会减小方差，从而减小总体的预测误差，这就是 James-Stein 估计量的原理。

不过，如果你仔细观察会发现，实际上 (4.3) 的第一项就是方差，第二项是偏差。因而，偏差-方差权衡（代数直观）和几何直观其实在说同一件事情。

- 为什么 James-Stein 估计量在一维和二维空间中不起效？Lawrence Brown 证明了如下的定理：n 维空间中的朴素估计量是可接受的当且仅当 n 维空间中的简单对称随机游走以概率 1 无限次返回原点。这一惊人的联系揭示了这一问题的答案。

  一维和二维空间中的随机游走都会以概率 1 无限次返回原点，因此朴素估计量是可接受的，所以我们不可能找到更好的估计量。而更高维的空间中，随机游走以概率 1 无限次返回原点的概率是 0，因此朴素估计量是不可接受的，所以 James-Stein 估计量就起效了！

- Stein 悖论不意味着“中国茶叶的价格可以帮助预测墨尔本的降雨概率”。尽管我们总是可以把毫不相关的随机事件捆绑在一起，然后利用 James-Stein 估计量减少总体的预测误差，但是这不意味着对其中任何一个事件的预测会更准确。

§4.1.3 为什么我们要正则化？远有潜龙，勿用

在前两节中，我们用了一些简单、理想化的模型说明了高维空间的一些奇异性质。尽管真实的机器学习问题远比这些讨论要复杂，但他们所带来的启示不容忽视。

在机器学习中，我们可以把问题都归结为参数估计问题。虽然参数空间的“原点”看起来并没有什么不同，但原点这一概念本身确实带着人类先验的知识。例如，如果一个神经网络的所有参数都是零，无论输入是什么，它都会输出全零。同样，在 Stein 悖论中，靠近原点就是会产生更好的估计量。

在机器学习中，我们同样有偏好“原点”的倾向，例如使用 L^2 正则化这样的技术可以使模型变得更简单，因此不太可能过拟合。本节的内容通过极端的例子展示了正则化背后的原理：在高维空间中，离原点较远的地方体积远大于靠近原点的地方。因此，在高维空间中，向原点收缩一点就能减少大量的参数空间。

换句话说，对于一个大型机器学习模型来说，过拟合的方式远多于欠拟合的方式，所以我们倾向于让模型更偏向于欠拟合：欠拟合只会带来少部分问题，而过拟合带来的是数不胜数、千奇百怪的问题。

模型越远离原点，它的行为就越难以控制和解释。高维几何与 Stein 悖论给我们的启示是，远离原点就会有危险，而在高维空间中，稍微远离原点就会引入大量危险。化用《周易》的一句话：

> “远有潜龙，勿用。”[1]

[1]原句出自《周易 · 乾卦》，“初九：潜龙勿用。”孔子对这句话的解释是如果身居下位，时机还没有成熟，

§4.2 集中不等式

我们在前一节中阐述了高维空间中怪诞反直觉的性质。从本节开始，我们将阐述高维空间中随机变量的另一重属性：集中不等式。集中不等式说明的是，尽管整个空间非常庞大、难以理解，但如果随机变量具有某些性质，那么它们的取值就会集中在某个非常小的区域内，因而并没有我们所设想的那么复杂。利用这一原理，我们可以将非常高维的数据压缩到一个较为低维的空间中，从而可以驾驭他们。

接下来，我们先做一些准备工作，更详细的讨论参见附录 C。我们先引入示性函数的概念.

定义 4.3 (示性函数) 对事件 A，定义 A 的**示性函数**为一个从样本空间 Ω 到 $\mathbb{R}$ 的随机变量：

$$I(A)(\omega) := \begin{cases} 1, & \omega \in A. \\ 0, & \omega \notin A. \end{cases}$$

从定义就可以得到如下基本性质：

命题 4.2 *设 A, B 是两个事件，则*

1. $I(AB) = I(A)I(B)$.
2. $I(A)^2 = I(A)$.
3. $I(A \cup B) = I(A) + I(B) - I(AB)$.

证明. 这里只作为一个示意，证明第三点，其他都类似. 我们需要证明，对任意样本点 $\omega \in \Omega$，我们有

$$I(A \cup B)(\omega) = I(A)(\omega) + I(B)(\omega) - I(AB)(\omega).$$

假设 $\omega \in A \cup B$，那么左边等于 1. 我们分类讨论：

- 如果 $\omega \in A$，那么右边第一项为 1.
  - 如果 $\omega \in B$，那么右边第二项为 1. 此时自然也有 $\omega \in AB$，所以右边第三项为 1，因此右边等于 1，等于左边.

应当像潜藏的龙一样不要施展你的才干。这里，复杂的、远离原点模型就像是潜龙，隐藏着巨大的力量，但是现在人类对他们的理解还远远不够，因此我们应当保持谨慎，不要轻易使用。

- 如果 $\omega \notin B$，那么右边第二项为 0. 此时自然也有 $\omega \notin AB$，所以右边第三项为 0，因此右边等于 1，等于左边.

• 如果 $\omega \notin A$，那么右边第一项为 0. 此时必须有 $\omega \in B$，所以右边第二项为 1. 但是此时自然也有 $\omega \notin AB$，所以右边第三项为 0，因此右边等于 1，等于左边.

如果 $\omega \notin A \cup B$，讨论类似，这里不再赘述. □

示性函数之所以重要，是因为它联系了期望与概率. 我们先来看一个显然的命题：

命题 4.3 *设 A 是一个事件，则*

$$\mathbb{E}[I(A)] = \Pr(A).$$

示性函数可以把对概率的计算变成对期望的计算. 回忆期望的线性性（见命题 C.10）：设 $a, b \in \mathbb{R}$，X, Y 是有期望的随机变量，那么成立

$$\mathbb{E}(aX + bY) = a\mathbb{E}(X) + b\mathbb{E}(Y).$$

利用期望的线性性，示性函数可以导出很多概率恒等式与不等式. 例如：容斥公式

$$\begin{aligned}\Pr(A \cup B) &= \mathbb{E}[I(A \cup B)] = \mathbb{E}[I(A) + I(B) - I(AB)] \\ &= \mathbb{E}[I(A)] + \mathbb{E}[I(B)] - \mathbb{E}[I(AB)] \\ &= \Pr(A) + \Pr(B) - \Pr(AB).\end{aligned}$$

对于概率论以及机器学习理论来说，下面的这个不等式非常重要：

定理 4.4 (Markov 不等式) *如果 X 是非负有期望的随机变量，$a > 0$，那么*

$$\Pr(X \geq a) \leq \frac{\mathbb{E}[X]}{a}.$$

证明. 直接利用示性函数，我们有：

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[X] =& \mathbb{E}[XI(X \geq a) + XI(X < a)] \\ =& \mathbb{E}[\underbrace{XI(X \geq a)}_{\geq aI(X \geq a)}] + \mathbb{E}[\underbrace{XI(X < a)}_{\geq 0}] \\ \geq& a\mathbb{E}[I(X \geq a)] = a\Pr(X \geq a).\end{aligned}$$

□

注意，为了使得证明有效，我们必须要假设上面的推导中出现的期望都是存在的，当然这实际上很容易验证. 为了避免不必要的技术细节，在后面的所有证明以及推导中，我们都会默认写出来的期望是存在的，不再赘述.

我们利用 Markov 不等式可以直接得到以下结果.

推论 4.2 (Chebyshev 不等式) *设 X 是任意有方差的随机变量，那么对任意 $a > 0$，成立*

$$\Pr(|X - \mathbb{E}[X]| \geq a) \leq \frac{\mathsf{Var}(X)}{a^2}.$$

证明. 设 $Y = (X - \mathbb{E}[X])^2$，$t = a^2$，那么 Y 是非负随机变量，且 $\mathbb{E}[Y] = \mathsf{Var}(X)$，于是由 Markov 不等式，我们有

$$\begin{aligned}\Pr(|X - \mathbb{E}[X]| \geq a) &= \Pr(|X - \mathbb{E}[X]|^2 \geq a^2) \\ &= \Pr(Y \geq t) \\ &\leq \frac{\mathbb{E}[Y]}{t} = \frac{\mathsf{Var}(X)}{a^2}.\end{aligned}$$

□

Chebyshev 不等式告诉我们采样到偏离其期望的概率有一个上界. 像这样利用矩（即 $\mathbb{E}[f(X)]$）来估计概率上界的方法被称为*矩法*.

实际上，很多情况下，偏离期望是非常小概率的事件，远小于上面的估计值. 为了得到更精确的上界，我们需要一些技巧. 考虑任意随机变量 X，对 $\lambda > 0$，

$$X \geq a \iff \lambda X \geq \lambda a \iff \mathrm{e}^{\lambda X} \geq \mathrm{e}^{\lambda a}.$$

由 Markov 不等式（如何得到?），

$$\Pr(X \geq a) = \Pr\left(\mathrm{e}^{\lambda X} \geq \mathrm{e}^{\lambda a}\right) \leq \mathrm{e}^{-\lambda a} \cdot \mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{\lambda X}\right].$$

注意到这个不等式应该对任意 $\lambda > 0$ 成立，所以

$$\Pr(X \geq a) \leq \inf_{\lambda > 0} \mathrm{e}^{-\lambda a} \cdot \mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{\lambda X}\right].$$

以上方法可以得到概率更精确的上界. 这样用指数进行推导的方法称为*指数矩*或 *Cramér-Chernoff 方法*.

利用指数矩，我们可以更加精确地研究 Chebyshev 不等式中随机变量所表现出来的性质，这种性质被称为概率的*集中性*. 我们可以用*集中不等式*来刻画这样的性质. 这样的不等式描述随机变量 X 有多大概率偏离某个值 μ 多少值（t），它表现为

$$\Pr(|X - \mu| \geq t) \leq \text{小量}.$$

通常来说，μ 是随机变量的期望或者中位数，在这本书中，只会讨论关于期望的集中性. 我们可以看到 Chebyshev 不等式就是一种特殊的集中不等式，但是它的界太松. 利用指数矩，我们将证明界更紧的 Hoeffding 不等式和 Chernoff 不等式.

定理 4.5 (Hoeffding 不等式) *设 $X_1, \dots, X_n$ 相互独立且服从对称 Bernoulli 分布，即 X_i 满足 $\Pr(X_i = 1) = 1 - \Pr(X_i = -1) = 1/2$. 考虑向量 $a = (a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{R}^n$，对任意 $t \geq 0$，我们有*

$$\Pr\left(\sum_{i=1}^{n} a_i X_i \geq t\right) \leq \exp\left(-\frac{t^2}{2\|a\|_2^2}\right).$$

证明. 由指数矩，我们有

$$\begin{aligned}
\Pr\left(\sum_{i=1}^{n} a_i X_i \geq t\right) &= \Pr\left(\exp\left(\lambda \sum_{i=1}^{n} a_i X_i\right) \geq \exp(\lambda t)\right) \\
&\leq \mathrm{e}^{-\lambda t} \mathbb{E}\left[\exp\left(\lambda \sum_{i=1}^{n} a_i X_i\right)\right] \\
&= \mathrm{e}^{-\lambda t} \prod_{i=1}^{n} \mathbb{E}\left[\exp(\lambda a_i X_i)\right].
\end{aligned}$$

这个不等式对任意 $\lambda > 0$ 都成立. 利用 $X_1, \dots, X_n$ 服从对称 Bernoulli 分布，得到（习题）[lhy: 习题]

$$\mathrm{e}^{-\lambda t} \prod_{i} \mathbb{E}\left[\exp(\lambda a_i X_i)\right] \leq \exp\left(-\lambda t + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i} a_i^2\right). \tag{4.4}$$

由于这一不等式对任意 $\lambda > 0$ 都成立，根据二次函数的性质，取 $\lambda = t / \sum_i a_i^2$，可得

$$\begin{aligned}
\inf_{\lambda > 0} \exp\left(-\lambda t + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{i} a_i^2\right) &= \exp\left(-\frac{t}{\sum_i a_i^2} t + \frac{1}{2}\left(\frac{t}{\sum_i a_i^2}\right)^2 \sum_{i} a_i^2\right) \\
&= \exp\left(-\frac{t^2}{2\|a\|_2^2}\right).
\end{aligned}$$

□

利用相同的证明技巧，我们可以证明一般形式的 Hoeffding 不等式（见习题[lhy: 出一下]）.

定理 4.6 (Hoeffding 不等式，一般情形) *设 $X_1, \dots, X_n$ 是相互独立的随机变量，对任意 i 都成立 $X_i \in [m_i, M_i]$. 那么对任意 $t \geq 0$，我们有*

$$\Pr\left(\sum_{i=1}^{n} (X_i - \mathbb{E}[X_i]) \geq t\right) \leq \exp\left(-\frac{2t^2}{\sum_{i=1}^{n} (M_i - m_i)^2}\right).$$

下面我们介绍 Chernoff 不等式.

定理 4.7 (Chernoff 不等式) 设 $X_1, \ldots, X_n$ 是相互独立的随机变量，分别服从于参数为 $p_1, \ldots, p_n$ 的 *Bernoulli* 分布. 记 $\sum_{i=1}^{n} X_i$ 的期望为 $\mu = \sum_{i=1}^{n} p_i$，对于任意 $t > \mu$，我们有

$$\Pr\left(\sum_{i=1}^{n} X_i \geq t\right) \leq \mathrm{e}^{-\mu}\left(\frac{\mathrm{e}\mu}{t}\right)^{t}.$$

这里 e 是自然对数的底数.

证明. 和证明 Hoeffding 不等式的第一步相同，我们先利用指数矩，对任意 $\lambda > 0$ 有

$$\Pr\left(\sum_{i=1}^{n} X_i \geq t\right) \leq \mathrm{e}^{-\lambda t}\prod_{i=1}^{n}\mathbb{E}\left[\exp(\lambda X_i)\right].$$

然后，将 $\prod_{i=1}^{n}\mathbb{E}[\exp(\lambda X_i)]$ 进一步放缩：

$$\begin{aligned}\prod_{i=1}^{n}\mathbb{E}\left[\exp(\lambda X_i)\right] &= \prod_{i=1}^{n}\left(\mathrm{e}^{\lambda}p_i + (1-p_i)\right)\\ &\leq \prod_{i=1}^{n}\exp\left((\mathrm{e}^{\lambda}-1)p_i\right).\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}\Pr\left(\sum_{i=1}^{n} X_i \geq t\right) &\leq \mathrm{e}^{-\lambda t}\prod_{i=1}^{n}\exp\left((\mathrm{e}^{\lambda}-1)p_i\right)\\ &= \mathrm{e}^{-\lambda t}\exp\left((\mathrm{e}^{\lambda}-1)\sum_{i=1}^{n}p_i\right)\\ &= \exp\left(\mu\mathrm{e}^{\lambda} - t\lambda - \mu\right).\end{aligned}$$

右边的最小值在 $\lambda = \log(t/\mu)$ 取得，代入得到：

$$\Pr\left(\sum_{i=1}^{n} X_i \geq t\right) \leq \mathrm{e}^{-\mu}\left(\frac{\mathrm{e}\mu}{t}\right)^{t}.$$

□

§4.3 J-L 引理的陈述与证明

有了上面矩法的准备，我们可以陈述并证明 J-L 引理了.

定理 4.8 (Johnson-Lindenstrauss 引理) 给定 N 个单位向量 $v_1, \dots, v_N \in \mathbb{R}^m$ 和 $n > 24 \log N/\epsilon^2$，随机矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 每个元素独立重复采样自 $\mathcal{N}(0, 1/n)$，$\epsilon \in (0,1)$ 是给定常数，那么至少有 $(N-1)/N$ 的概率，使得对所有的 $i \neq j$，都成立

$$(1-\epsilon)\left\|v_i - v_j\right\|_2^2 < \left\|Av_i - Av_j\right\|_2^2 < (1+\epsilon)\left\|v_i - v_j\right\|_2^2.$$

我们可以把 n 理解成降维后的维度，Av_i 是降维后的向量. 这个引理告诉我们只要 $n > 24 \log N/\epsilon^2$，我们就可以用变换 A 把原本 m 维的向量映射到 n 维空间，并且保证它们相对距离的偏离不超过 ϵ.

通常来说，相对距离编码了很多重要的信息。例如，如果两个人的年龄、身高、体重等属性相差很小，那么他们也应该更相似。在这种观点下，我们可以把 A 看成一个损失率很低的压缩变换. 不严格地说，

> 塞下 N 个向量，只需要 $\mathcal{O}(\log N)$ 维空间.

值得注意的是，J-L 引理中压缩空间的维数并不依赖于原始空间的维数，而只依赖于数据的数量. 因此，这对于一些抽象空间中数据的降维是非常有用的，见第 4.4 节.

下面我们开始证明 J-L 引理. 为了看出来证明的思路，我们第一个任务是算出压缩后 Av_i 的分布. 我们首先回忆一些正态向量的基本性质（参考附录 C.4）。

命题 4.4 假设 $u \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ 是一个 n 维正态向量，M 是一个 $m \times n$ 矩阵，那么 Mu 是一个 m 维正态向量，并且 $Au \sim \mathcal{N}(M\mu, M\Sigma M^T)$.

利用这一个命题，很容易可以得到 Av_i 的分布：

引理 4.1 假设 $u \in \mathbb{R}^m$ 是一个单位向量，那么 $Au \sim \mathcal{N}(0, n^{-1} I_n)$.

证明. 将 A 视作一个 mn 维的正态向量，注意到，$(Au)_i = \sum_{j=1}^m A_{ij} u_j$，所以 Au 是一个从向量 A 线性变换得到的向量. 根据命题 4.4，Au 是一个正态向量，只需计算它的期望和协方差矩阵.

注意到，对不同的 i，向量 $(A_{ij})_j$ 相互是独立的，所以分量 $(Au)_i$ 相互也是独立的，因此只需要计算正态变量 $(Au)_i$ 的期望与方差. 其期望为 $\sum_{j=1}^m 0 \cdot u_j = 0$，方差为

$$\sum_{j=1}^m \left(\frac{1}{n} \cdot u_j^2\right) = \frac{1}{n}.$$

所以 Au 的期望是 0，协方差矩阵是 $n^{-1} I_n$. □

然而，我们关心的其实不单单是 Av_i 的分布，更重要的其实是 $Av_i - Av_j$ 的分布，即压缩后的向量之间的相对距离。不过，我们并不需要做额外的什么计算，我们直接有如下结果：

引理 4.2 向量 $u = \frac{v_i - v_j}{\|v_i - v_j\|_2}$ 是一个单位向量，因此 $Au \sim \mathcal{N}(0, n^{-1} I_n)$.

J-L 引理实际上在说，$\|Au\|_2$ 偏离 1 的一定程度的概率是非常小的. 于是，为了证明 J-L 引理，我们最重要的任务是给出 Au 这样向量模长的集中不等式：

引理 4.3 (单位模引理) 设 $u \sim \mathcal{N}(0, n^{-1} I_n)$，$\epsilon \in (0,1)$ 是给定的常数，那么我们有

$$\Pr(|\,\|u\|_2^2 - 1| \geq \epsilon) \leq 2\exp\left(-\frac{\epsilon^2 n}{8}\right).$$

注意到 $\mathbb{E}[\|u\|_2^2] = n \cdot (1/n) = 1$，所以这个引理在说高维空间中，如果正态向量具有单位模长平方期望，那么它的模长就会集中在单位长度附近，因此称为单位模引理.

证明. $|\,\|u\|_2^2 - 1| \geq \epsilon$ 发生有两种可能，$\|u\|_2^2 - 1 \geq \epsilon$ 和 $1 - \|u\|_2^2 \geq \epsilon$. 我们先来计算 $\|u\|_2^2 - 1 \geq \epsilon$ 的概率，根据指数矩，

$$\Pr\left(\|u\|_2^2 - 1 \geq \epsilon\right) \leq \inf_{\lambda > 0} \left\{ \mathrm{e}^{-\lambda(\epsilon+1)} \mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{\lambda \|u\|_2^2}\right] \right\}.$$

因为 u 的各个分量是相互独立的，所以我们可以把 $\|u\|_2^2$ 展开

$$\mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{\lambda \|u\|_2^2}\right] = \mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{\lambda \sum_i u_i^2}\right] = \mathbb{E}\left[\prod_i \mathrm{e}^{\lambda u_i^2}\right] = \prod_i \mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{\lambda u_i^2}\right].$$

可以算得 $\mathbb{E}\left[\mathrm{e}^{\lambda u_i^2}\right] = \sqrt{n/(n-2\lambda)}$（见习题[lhy: 出一下]），所以

$$\Pr\left(\|u\|_2^2 - 1 \geq \epsilon\right) \leq \inf_{\lambda > 0} \left\{ \mathrm{e}^{-\lambda(\epsilon+1)} \left(\frac{n}{n-2\lambda}\right)^{n/2} \right\}.$$

可以验证最小值在 $\lambda = n\epsilon/(2(1+\epsilon))$ 处取到，代入可得

$$\Pr\left(\|u\|_2^2 - 1 \geq \epsilon\right) \leq \mathrm{e}^{n(\log(1+\epsilon) - \epsilon)/2} \leq \mathrm{e}^{-n\epsilon^2/8}.$$

这里最后一个不等号使用了不等式 $\log(1+\epsilon) \leq \epsilon - \epsilon^2/4$.

计算 $1 - \|u\|_2^2 \geq \epsilon$ 的概率的过程和 $\|u\|_2^2 - 1 \geq \epsilon$ 几乎完全相同的，可以得到

$$\Pr\left(1 - \|u\|_2^2 \geq \epsilon\right) \leq \mathrm{e}^{n(\log(1-\epsilon) + \epsilon)/2} \leq \mathrm{e}^{-n\epsilon^2/8}.$$

$$\begin{aligned}\Pr\left(|\,\|u\|_2^2 - 1| \geq \epsilon\right) &\leq \Pr\left(\|u\|_2^2 - 1 \geq \epsilon\right) + \Pr\left(1 - \|u\|_2^2 \geq \epsilon\right) \\ &\leq 2\mathrm{e}^{-n\epsilon^2/8}.\end{aligned}$$

□

有了单位模引理，我们就可以很容易证明 J-L 引理了. 将引理 4.2 中的 u 带入单位模引理，得到

$$\Pr\left(\left|\left\|\frac{A(v_i-v_j)}{\|v_i-v_j\|_2}\right\|_2^2-1\right|\geq\epsilon\right)\leq 2\exp\left(-\frac{\epsilon^2 n}{8}\right).$$

这个结论对任意 $i\neq j$ 成立，因此遍历所有 i,j 对，可得

$$\begin{aligned}\Pr\left(\exists(i,j):\left|\left\|\frac{A(v_i-v_j)}{\|v_i-v_j\|_2}\right\|_2^2-1\right|\geq\epsilon\right)&\leq 2\sum_{i\neq j}\exp\left(-\frac{\epsilon^2 n}{8}\right)\\&=2\binom{N}{2}\exp\left(-\frac{\epsilon^2 n}{8}\right).\end{aligned}$$

换言之，对任意 i,j，$\left|\left\|\frac{A(v_i-v_j)}{\|v_i-v_j\|_2}\right\|_2^2-1\right|<\epsilon$ 都成立的概率不小于

$$1-2\binom{N}{2}\exp\left(-\frac{\epsilon^2 n}{8}\right)=1-N(N-1)\exp\left(-\frac{\epsilon^2 n}{8}\right).$$

代入 $n>\frac{24\log N}{\epsilon^2}$，可得这一概率

$$1-N(N-1)\exp\left(-\frac{\epsilon^2 n}{8}\right)\geq 1-N(N-1)N^{-3}\geq 1-N^{-1}=\frac{N-1}{N}.$$

很多时候，我们关心的并不是向量间的距离，而是向量的内积（比如使用余弦度量的时候），这时候我们可以使用内积版本的 J-L 的引理：

定理 4.9 (J-L 引理，内积形式) 给定 N 个单位向量 $v_1,\dots,v_N\in\mathbb{R}^m$ 和 $n>24\log N/\epsilon^2$，随机矩阵 $A\in\mathbb{R}^{n\times m}$ 每一个元素都独立重复采样自 $\mathcal{N}(0,1/n)$，$\epsilon\in(0,1)$ 是给定常数，那么至少有 $(N-1)/N$ 的概率，使得对所有的 $i\neq j$，都成立

$$|\langle Av_i,Av_j\rangle-\langle v_i,v_j\rangle|<\epsilon.$$

证明. 由原始 J-L 引理可知，至少有 $\frac{N-1}{N}$ 的概率满足对于任意 $i\neq j$ 有：

$$\begin{aligned}(1-\epsilon)\|v_i-v_j\|_2^2<\|Av_i-Av_j\|_2^2<(1+\epsilon)\|v_i-v_j\|_2^2,\\(1-\epsilon)\|v_i+v_j\|_2^2<\|Av_i+Av_j\|_2^2<(1+\epsilon)\|v_i+v_j\|_2^2.\end{aligned}$$

我们将第一行乘 -1 加到第二行可以得到

$$4\langle v_i,v_j\rangle-2\epsilon(\|v_i\|_2^2+\|v_j\|_2^2)<4\langle Av_i,Av_j\rangle<4\langle v_i,v_j\rangle+2\epsilon(\|v_i\|_2^2+\|v_j\|_2^2).$$

因为 v_i,v_j 是单位向量，所以上式等价于 $|\langle Av_i,Av_j\rangle-\langle v_i,v_j\rangle|<\epsilon$. □

§4.4 J-L 引理的应用

J-L 引理描述的是对于 N 个向量，我们可以将它们降到 $\mathcal{O}(\log N)$ 维空间，并将相对距离（或内积）的误差控制在一定范围内. 它的内容本身就和降维相关，所以最基本的应用就是直接作为降维方法. 下面我们将介绍两个具体的应用案例说明 J-L 引理如何指导我们在深度学习中选择合适的维度.

例 4.1 (词向量维度) 在为自然语言建立深度学习模型的时候，我们面对的首要问题就是如何在计算机中表示语言。我们以中文为例。如果我们看一句话，中文组成的基本单元是词。比如，这句话就可以被分解为如下成分：

比如 / ，/ 这句话 / 就 / 可以 / 被 / 分解 / 为 / 如下 / 成分

任何的中文句子都可以被这样分解，变成一个词的序列。这一过程被称为分词. 于是，为了表示一段中文，我们只需要能够表示所有的词。

于是，一个基本的任务就是如何表示一个词. 词向量就是这样的一个表示方法. 它的想法很简单：我们用一个向量空间来表示所有的词，每个词对应一个向量，我们用 $v(w)$ 来表示词 w 对应的向量.

很多时候，这些向量之间的关系可以反映出词之间的语义关系. 例如，“男人”和“女人”之间差异应该和“国王”和“女王”之间差异是类似的. 也就是说，我们希望

$$v(\text{男人}) - v(\text{女人}) \approx v(\text{国王}) - v(\text{女王}).$$

这里，$\approx$ 表示两个向量之间比较相似。具体来说，我们通常会用向量的内积来衡量相似度. 也就是说，给定一个词 w，我们希望

$$\langle v(w), v(\text{男人}) - v(\text{女人}) \rangle \approx \langle v(w), v(\text{国王}) - v(\text{女王}) \rangle .$$

我们可以想象，在真实的世界中，所有的词也构成了一个抽象向量空间，以类似的方式来表示词之间的关系，但这个向量空间的维数我们完全不得而知。对于计算机来说，我们需要选择一个确定的、压缩过的空间来表示词向量。

为了表示这种相似性，在压缩过的词向量空间中，所有词之间的内积应该尽量保持词本身的相似度。这正是内积形式的 J-L 引理（定理 4.9）所描述的情况。于是，J-L 引理告诉我们，$\mathcal{O}(\log N)$ 维空间足以容纳下 N 个单词，还保持了单词之间的相似性。

到此时，我们要十分警惕“理论指导实践”这一表述的理解。J-L 引理（理论）所指导的结论，成立的前提是“正态随机矩阵”，然而我们完全不清楚单词的空间是否符合这一条件。所以，我们不能说 J-L 引理直接给了我们合适的词向量维度，我们只能说 J-L 引理给了词向量选择的一个直觉。具体应该用多少维度的词向量，还需要实验来验证. □

例 4.2 (多头注意力) *注意力机制*是现代深度学习架构中最核心的模块之一。注意力机制的一种理解方式是将其看作一个键-值存储。想象我们把数据都存储到了一个数据库中，它的存储方式是 $\{k_i : v_i\}$，其中 k_i 是键，v_i 是值，例如“性别：男”就是一种典型的键值对，其中“性别”是键，而“男”是值。

现在，假设数据库中的所有键、值对是 $\{k_i : v_i\}_{i=1}^N$，我们希望从中找到与某个查询 q 最接近的键对应的值. 在深度学习中，键、值、查询都可以按照例 4.1 的方式表示成向量。类似地，我们可以用内积来衡量键和查询的相似度。

假设这些查询和键的向量都处在 $\mathbb{R}^d$ 中，那么注意力的计算公式为

$$a_j = \frac{\mathrm{e}^{\langle q, k_j \rangle}}{\sum_{j=1}^N \mathrm{e}^{\langle q, k_j \rangle}}.$$

换言之，我们把相似性转化为了概率分布，相似度越高的键，被选中的概率越大. 我们把 d 成为*注意力头大小*，在很多深度学习框架中，它被记为 `head_size`.

在很多场景下，一个数据库只能查询一种键-值对的关系，对于一些复杂的问题，我们可能需要查询多种不同的键-值对. 例如，对于中文来说，两个词的意思是否相近可以形成一个数据库，而两个词的词性是否相近又可以形成另一个数据库. 因此，我们需要多个注意力机制来查询不同的数据库，这就是*多头注意力*.

在简化的场景下，我们可以假设所有数据库里的 $k_i : v_i$ 对都是一致的，只是查询 q_i 不同. 那么，多头注意力就是要计算

$$a_{ij} = \frac{\mathrm{e}^{\langle q_i, k_j \rangle}}{\sum_{j=1}^N \mathrm{e}^{\langle q_i, k_j \rangle}}.$$

类似例 4.1 的问题，如果真实世界中 a_{ij} 是 p_{ij}，我们应该如何选择向量维数 d 才能保证 a_{ij} 能够足够好地逼近 p_{ij} 呢？这个问题和例 4.1 是一样的.

在这个例子中，词向量的维度变成了 d，词表大小变成了数据库中的键值对数量 N. J-L 引理告诉我们的答案依然是只需要 $\mathcal{O}(\log N)$ 的空间就足以容纳下 N 个键值对，还能保持多组查询与键之间的相似性。

更为重要的是，这个压缩空间的维度 d 和查询的数量无关。这说明，如果有同样多的参数，头很大的单头注意力机制并不如头很小的多头注意力机制。此外，这也说明无论多少个头，多头注意力的 d 并不需要随着头的数量增加而显著增加.

同样地，J-L 引理只是给了我们一个直觉，具体的维度选择还需要实验来验证. □

§4.5 附录：Stein 悖论的证明

在本节，我们将给出 Stein 悖论（定理 4.3）的证明。

[lhy: TODO]

§4.6 习题

[lhy: TODO]

§4.7 章末注记

[lhy: TODO]

第五章　差分隐私

2006 年，Netflix 发起了一场全球竞赛，名为 Netflix Prize，旨在提升其电影推荐系统的精确度. 当时，Netflix 还主要是一家邮寄 DVD 的租赁服务公司，推荐系统对于帮助用户发现可能喜欢的电影至关重要. 为了激励全球数据科学家参与，Netflix 提供了 100 万美元的大奖，奖励给能将其推荐算法精度提高 10% 的团队.

Netflix 为比赛公开了一份庞大的数据集，包含超过一亿条匿名化的电影评分记录. 这些数据来自近五十万名用户，涉及约一万八千部电影. 为了保护隐私，Netflix 删除了所有直接的个人标识符，每个用户仅用一个随机的数字 ID 代替. 同时，性别、年龄、邮政编码等信息也被去除.

然而，几周后，德克萨斯大学的博士生 Arvind Narayanan 和导师 Vitaly Shmatikov 证明，即使数据被匿名化，也能通过公开的互联网电影数据库（IMDb）进行去匿名化. 他们发现，攻击者只需掌握用户在几部电影上的评分和时间，就能在 Netflix 数据集中重新识别出这个用户. 这一发现揭示了严重的隐私风险.

这个隐私问题导致了一起重要的诉讼案件. 一位未公开其性取向的同性恋母亲认为，Netflix 数据集的去匿名化可能会使她的性取向曝光，进而影响她的职业生涯和家庭生活. 她对 Netflix 提起了诉讼，要求 Netflix 根据《视频隐私保护法案》赔偿每位用户 2,500 美元，总计超过 5 亿美元. 最终，Netflix 与她达成了和解，并决定取消计划中的第二届 Netflix Prize 竞赛.

直到 2024 年，Netflix 也在也没有举办过第二届 Netflix Prize 竞赛，它的服务也已经转变到互联网上的在线视频为主. 然而，在当今世界，数据隐私的问题反而变得愈发严重. 我们每天看的在线视频、购物、社交网络等行为都会产生大量的数据，根据 Statista 在 2020 年的一项估计，2024 年每人每天产生的数据量会达到 63.5GB! 然而，这些数据都被私人公司所掌握！

本章我们关心数据的另一个维度：社会属性. 尽管基于大数据和机器学习的技术的确改善了我们的生活，但是对数据的滥用也会带来严重的社会问题. 如何保护个体的隐私，同时又能够让机器学习得到足够的数据? **差分隐私**就是解决这个问题的一个方法，本

章将更详细地介绍差分隐私的概念和应用.

§5.1 数据隐私问题

本章开篇的 Netflix Price 案例展示了一个典型的数据隐私问题. 实际上，不仅资本需要数据，科研也极其需要数据. 以医学为例，我们需要大量真实的病人提供病情数据. 但这些数据可能都涉及到病人的隐私信息，例如一些*敏感数据*. 因此，我们必须找到一种方法，既可以收集到这些数据，又保护病人的隐私信息.

保护病人的隐私信息的一种理解是不会让数据获得者将数据和人对应起来. 那么最直观的想法就是将每条*数据匿名化*. 比如，每条数据只包含患者的生日、性别、邮政编号（代表位置[1]）和病情.

这样做依然有问题：同一天生日、同一性别、相同邮政编号的人很少，而这些信息很容易被找到，比如，在家过生日的时候，在微博上分享了带定位的生日照. 通过一条数据的各种属性可以轻易定位到这个人，这样的匿名化是不安全的.

以上例子展现的是一种*去匿名化*的现象，也就是说匿名的数据实际上揭示了数据对应的那个个体. 这去匿名化的出现都是因为多维数据具有*稀疏性*，也就是说，尽管维数很高，但是同时满足多个条件的数据却很少.

比如我们看表 5.1，这是医院甲的病人数据表. 56 岁的病人只有赵丽娜，所以假如我们知道赵丽娜的年龄并了解到她去过这家医院，便立即得知她患有艾滋病.

姓名	年龄	性别	邮政编码	是否吸烟	诊断
李国强	64	男性	190146	是	心脏病
王秀英	61	女性	190118	否	关节炎
张建华	67	男性	190104	是	肺癌
陈玉兰	63	女性	190146	否	克罗恩病
刘志强	69	男性	190115	是	肺癌
赵丽娜	56	女性	190103	否	艾滋病
周志成	52	男性	190146	是	糖尿病
马文杰	59	男性	190130	是	过敏性鼻炎
李梅	55	女性	190146	否	溃疡性胃炎

表 5.1: 医院甲的病人数据表

[1]如果研究的是传染病，那么位置的意义也是很大的.

类似第四章，一种减少稀疏性的思想是*降维*，也就是我们用更粗糙的表示方法，但是让多维数据中同时满足多个条件的数据变得更多.

具体到隐私的情景下，我们称之为*k-匿名性*：任何一个人的信息都不能和其他至少 $(k-1)$ 人区分开. 比如，可以不明确写出姓名、年龄和邮编，只给出模糊的范围，于是数据变成了下面的表 5.2. 此时，有一个人的信息和赵丽娜完全相同，但是得了不同的病，这样赵丽娜的隐私就得到了保护.

姓名	年龄	性别	邮政编码	是否吸烟	诊断
*	60-70	男	1901**	是	心脏病
*	60-70	女	1901**	否	关节炎
*	60-70	男	1901**	是	肺癌
*	60-70	女	1901**	否	克罗恩病
*	60-70	男	1901**	是	肺癌
*	50-60	女	1901**	否	艾滋病
*	50-60	男	1901**	是	糖尿病
*	50-60	男	1901**	是	过敏性鼻炎
*	50-60	女	1901**	否	溃疡性胃炎

表 5.2: 医院甲的病人数据表，模糊了姓名、年龄和邮编

这种方法仍然存在问题，因为我们不能把关键信息（病症信息）也模糊化. 如果我们还拿到了另一家医院乙模糊之后的病人数据表（表 5.3），那么依然有办法定位到赵丽娜. 这两张表上 50-60 岁的女性只有艾滋病是重合的，因此，如果我们知道赵丽娜的年龄并知道她同时去过两家医院，便立即得知她患有艾滋病.

姓名	年龄	性别	邮政编码	诊断
*	50-60	女	1901**	艾滋病
*	50-60	女	1901**	系统性红斑狼疮
*	50-60	女	1901**	干燥综合征
*	60-70	男	1901**	胰腺癌
*	60-70	男	1901**	肝硬化
*	60-70	男	1901**	通风

表 5.3: 医院乙的病人数据表，模糊了姓名、年龄和邮编

除了使用匿名化的手段，还有一种方法可以保护隐私：不再提供单人的数据，而是直接公布将数据集的总体信息，比如平均值. 但这种方法也不一定能保证不泄露单人数据，请看下面的例子.

在第 3.4 节 中我们介绍过，要训练一个生成式语言模型（例如 ChatGPT），需要大量的文本数据. 这些文本数据通常都是公司的机密，我们不得而知. 然而，我们可以用很简单的手段来推测这些数据.

2023 年 12 月 27 日，《纽约时报》因版权侵犯问题对 OpenAI 和微软提起诉讼. 该报指控这两家公司在训练其自动聊天机器人（即 ChatGPT）时，未经许可使用了数百万篇《纽约时报》的文章. 这些聊天机器人如今被视为可信的信息来源，并与《纽约时报》等新闻机构展开了直接竞争.

《纽约时报》在诉讼中提到几个实例，显示聊天机器人提供的内容几乎与《纽约时报》的文章完全一致，而这些文章在《纽约时报》的网站上需付费订阅才能阅读. 该报表示，OpenAI 和微软特别强调在训练过程中使用了《纽约时报》的报道，因其认为这些材料具备可靠性和准确性.

本案件如同罗生门，只要微软和 OpenAI 不主动承认，没有人可以证明他们确实使用了《纽约时报》的文章. 然而，这一案例足够说明一个道理：即使不提供模型本身，只提供模型的输出，也可能泄露出原始数据.

注. 以上这些内容都说明*匿名化*很难保护个人隐私. 那么，密码学*加密*的手段是否能够保护隐私？比如说，为什么我们的所有数据不能需要账号密码才能被访问？其实，加密和隐私在出发点上完全不同.

加密的目的是为了不让别人获取到真实数据. 而隐私不是简单地保护数据，它涉及更微妙的问题——我们希望利用这些数据，但是又不希望泄露某个个体的信息. 因此我们这里讨论的其实是隐私保护问题而不是加密问题，密码学的方案并不适用于这里.

§5.2 差分隐私的定义与性质

我们上面探讨了隐私保护的必要性以及它的微妙之处，现在我们要给出一种合理的方案解决隐私保护的问题，这个方案就是*差分隐私*. 要给出一个数学模型，不仅要知道什么情况下算是隐私泄漏，也需要知道什么情况下不算，所以我们再来看一个反面的例子.

李明是一位长期吸烟的男子，他参加了一项有关“吸烟与健康”的调查. 这项调查在不久后发布了一项结果，表明长期吸烟的人患上肺癌的几率更大. 伴随着这一结果的公布，保险公司在出售相同保险时会对长期吸烟者索要更高的价格. 李明当然也受到了这一政策的影响. 那我们是否可以认为这项研究泄露了李明的隐私（即更有可能患肺癌）呢?

直接告诉我们，这不应该算泄露了隐私. “长期吸烟的人患上肺癌的几率更大”这项结论并不依赖于李明是否参加了调查. 考虑这样的对照，x 代表原来参加调查的人的集合，x' 代表其他人不变，只是李明换成了另外一个人的集合. 如果是 x' 这些人参与了调查，结论是否会发生变化？大概率不会！

李明的例子告诉我们，隐私应该有以下性质：

> 当数据集中包含李明的信息，相比数据集中不包含李明的信息，并不会显著增加损害李明的利益的概率.

这一思想引出了*差分隐私*的概念，我们将在下面给出数学形式的定义.

考虑数据的空间 $\mathcal{X}$，其中的每一个元素都包含了个体的所有可能数据例如姓名、性别、年龄、国籍等. 考虑 n 个人的数据，形成了有序的数据集

$$x = (x_1, \cdots, x_n) \in \mathcal{X}^n.$$

我们希望对这些数据进行一定的加工，例如用这些数据来训练一个机器学习模型. 抽象来说，加工的过程可以被看成一个随机算法 A：在固定输入数据集 $x \in \mathcal{X}^n$ 下，$A(x)$ 是输出空间 $\mathcal{Y}$ 上的一个随机变量.

当我们改变（增加或删除）一个人的数据时，我们希望结果分布的变化可以控制在一定范围内. 为此，我们引入相邻数据集的概念：

定义 5.1 (k-相邻数据集) 设 $x, x' \in \mathcal{X}^n$，如果 x 和 x' 最多有 k 条数据不同，即至多存在 k 个不同的 $i_1, \ldots, i_k \in [n]$ 使得 $x_{i_j} = x'_{i_j}$ 对 $j \in [k]$ 成立，那么称 x 和 x' 是 **k-相邻的.**

特别地，如果 $k = 1$，我们称 x 和 x' 是**相邻的.**

在李明的例子中，我们把李明换掉之前和之后的数据集是 1-相邻的.

接下来我们给出差分隐私的定义. 直观上，不论数据集中是否包含某个人的数据，算法的输出分布不会有太大的变化，因而我们有：

定义 5.2 (差分隐私，ϵ-DP) 考虑随机算法 $A : \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}$，如果对于任意一对 1-相邻数据集 x, x'，对任意（可测）值集 $E \subseteq \mathcal{Y}$，有

$$\Pr(A(x) \in E) \leq \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \Pr(A(x') \in E),$$

那么我们称 A 为*数据集大小为 n 的 ϵ-DP 算法*.

这一定义看起来是不对称的，其实它是对称的，并且是用概率的比值衡量分布的差异.

命题 5.1 设 $A : \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}$ 是一个 ϵ-DP 算法，那么对于任意的 1-相邻数据集 x, x' 和任意（可测）值集 $E \subseteq \mathcal{Y}$，有

$$e^{-\epsilon} \leq \frac{\Pr(A(x) \in E)}{\Pr(A(x') \in E)} \leq \mathrm{e}^{\epsilon}.$$

证明. 不等式右边就是定义，左边只需要把定义中 x 和 x' 的地位互换即可. □

从这一性质出发，如果 ϵ 越接近 0，那么 A 的输出分布在相邻数据集上的变化就越小，也就是说隐私保护效果越好.

> **注.** 为什么选择用比值来衡量分布的差异，而不是直接用差值？注意，如果我们要讨论对数据的多重加工，那么加工之间的独立性就是一个很重要的性质. 独立性的定义就使用了乘法（也就是比值），而不是加法. 因此，我们将在后面看到，这样定义的差分隐私具有极其干净的数学性质.

以上定义需要对所有的（可测）值集 E 都成立，这给验证带来了极大的困难，如果随机算法的输出分布是更加常规的，我们可以简化验证的过程.

对于离散型的输出，我们有如下等价定义：

命题 5.2 如果 $A(x)$ 对于任意 $x \in \mathcal{X}^n$ 都是离散型随机变量，那么随机算法 A 是数据集大小为 n 的 ϵ-DP 算法当且仅当对于任意一对 1-相邻数据集 x, x' 和所有的 $y \in \mathcal{Y}$，有

$$\Pr(A(x) = y) \leq \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \Pr(A(x') = y).$$

证明. $\Longrightarrow$：取 $E = \{y\}$ 即可证明.

$\Longleftarrow$：假设 $E = \{y_1, \ldots, y_k, \ldots\} \subseteq \mathcal{Y}$. 对每一个 y_i，都有

$$\Pr(A(x) = y_i) \leq \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \Pr(A(x') = y_i).$$

因为 $A(\cdot) = y_i$ 对于不同的 i 是互斥事件，所以概率可以直接相加，于是：

$$\begin{aligned}
\Pr(A(x) \in E) &= \sum_i \Pr(A(x) = y_i) \\
&\leq \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \sum_i \Pr(A(x') = y_i) \\
&= \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \Pr(A(x') \in E).
\end{aligned}$$

□

对连续型的输出，我们有如下等价定义：

命题 5.3 如果 $A(x)$ 对于任意 $x \in \mathcal{X}^n$ 都是连续型随机变量，那么它存在概率密度函数，记为 h_x. 此时，随机算法 A 是数据集大小为 n 的 ϵ-DP 算法当且仅当对于任意一对 1-相邻数据集 x, x' 和几乎所有的 $y \in \mathcal{Y}$，有

$$h_x(y) \leq \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot h_{x'}(y).$$

证明. $\Longrightarrow$：这一部分的严格表述需要测度论的基础，所以这一证明从直观上理解即可，不需要考虑严格的定义. 如果需要看更严格的定义，请参阅附录 C.

定义集合

$$E = \{y : h_x(y) > \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot h_{x'}(y)\}.$$

我们证明 $\lambda(E) = 0$，其中 λ 是 Lebesgue 测度；也就是说，几乎所有的 y 都满足

$$h_x(y) \leq \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot h_{x'}(y).$$

为此，我们定义集合

$$E_n = \left\{ y : h_x(y) > \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot h_{x'}(y) + \frac{1}{n} \right\}, n = 1, 2, \ldots.$$

因为

$$E = \bigcup_{n=1}^{\infty} E_n,$$

所以我们只需要证明 $\lambda(E_n) = 0$，然后利用测度的次可加性即可证明 $\lambda(E) = 0$.

假设 $\lambda(E_n) > 0$，那么，在 E_n 上对密度函数积分，有

$$\int_{E_n} (h_x(y) - \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot h_{x'}(y)) \mathrm{d}y \geq \int_{E_n} \frac{1}{n} \mathrm{d}y = \frac{\lambda(E_n)}{n} > 0.$$

根据概率密度的定义，

$$\Pr(A(x) \in E_n) = \int_{E_n} h_x(y) \mathrm{d}y, \quad \Pr(A(x') \in E_n) = \int_{E_n} h_{x'}(y) \mathrm{d}y.$$

所以

$$\Pr(A(x) \in E_n) > \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \Pr(A(x') \in E_n).$$

这与 A 是 ϵ-DP 算法矛盾，所以 $\lambda(E_n) = 0$，这就完成了证明.

$\Longleftarrow$：依然根据概率密度函数的定义，考虑 $x, x' \in \mathcal{X}^n$，对任意可测 $E \subseteq \mathcal{Y}$，有

$$\begin{aligned} \Pr(A(x) \in E) &= \int_E h_x(y) \mathrm{d}y \\ &\leq \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \int_E h_{x'}(y) \mathrm{d}y \\ &= \mathrm{e}^{\epsilon} \cdot \Pr(A(x') \in E). \end{aligned}$$

□

接下来我们给出差分隐私的基本性质. 首先，如果我们对一组数据 x 依次独立使用两个差分隐私算法 A_1 和 A_2 进行处理（允许 A_2 使用 A_1 输出的结果），得到两组数据，那么总体上看，这整个过程还是一个差分隐私算法.

命题 5.4 (复合性，两个算法的情形) *A_1 和 A_2 是相互独立的随机算法，其中*

$$A_1 : \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}_1,$$
$$A_2 : \mathcal{Y}_1 \times \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}_2.$$

假设 A_1 是 ϵ_1-DP 算法，A_2 是 ϵ_2-DP 算法.

令 $A : \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}_1 \times \mathcal{Y}_2$ 是随机算法，输出为 $A(x) = (y_1, y_2)$，其中 $y_1 = A_1(x)$，$y_2 = A_2(y_1, x)$，那么 A 是 $(\epsilon_1 + \epsilon_2)$-DP 算法.

证明. 为了简化记号，这里我们只证明离散的情况，一般情况的证明类似. 令 x, x' 是 $\mathcal{X}^n$ 中的两个 1-相邻数据集，A 输出为 $y = (y_1, y_2) \in \mathcal{Y}_1 \times \mathcal{Y}_2$，那么根据定义和独立性，

$$\Pr(A(x) = (y_1, y_2)) = \Pr(A_1(x) = y_1) \cdot \Pr(A_2(y_1, x) = y_2).$$

由于 A_1 是 ϵ_1-DP 算法，A_2 是 ϵ_2-DP 算法，得到

$$\begin{aligned}
\Pr(A(x) = (y_1, y_2)) &= \Pr(A_1(x) = y_1) \cdot \Pr(A_2(y_1, x) = y_2) \\
&\le \mathrm{e}^{\epsilon_1} \Pr(A_1(x') = y_1) \cdot \mathrm{e}^{\epsilon_2} \Pr(A_2(y_1, x') = y_2) \\
&= \mathrm{e}^{\epsilon_1 + \epsilon_2} \cdot \Pr(A(x') = (y_1, y_2)).
\end{aligned}$$

□

现在，我们已经看到为什么差分隐私的定义是用比值来衡量的：比值陈述的差分隐私，这一命题的结论和证明都非常干净. 利用数学归纳法，很容易推广到多个随机算法的复合性：

命题 5.5 (复合性，多个算法的情形) *设 $A_1, A_2, \cdots, A_k$ 为一列相互独立的随机算法，*

$$A_1 : \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}_1,$$
$$A_i : \mathcal{Y}_1 \times \cdots \times \mathcal{Y}_{i-1} \times \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}_i, \quad i = 2, 3, \cdots, k.$$

也就是 A_i 将 $A_1, \cdots, A_{i-1}$ 的输出和 $\mathcal{X}^n$ 中的一个数据集作为输入元素. 对 $i = 1, \ldots, k$, A_i 是 ϵ_i-DP 算法.

依次运行算法 A_i 得到算法 $A : \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}_1 \times \cdots \times \mathcal{Y}_k$，那么 A 是 ϵ-DP，其中 $\epsilon = \sum_{i=1}^n \epsilon_i$.

证明. 对 n 用数学归纳法.

- 当 $n = 1$ 时，结论显然成立.
- 假设结论对 n 成立，我们要证明对 $n+1$ 结论成立.

  考虑前 n 个算法的复合算法

  $$A'(x) = (A_1(x), A_2(A_1(x), x), \cdots, A_n(A_{n-1}(\cdots A_1(x), \cdots), x)).$$

  由归纳假设，A' 是 $\sum_{i=1}^{n} \epsilon_i$-DP 算法.

  由于 A_{n+1} 是 ϵ_{n+1}-DP 算法，A' 与 A_{n+1} 的复合算法是 A，所以利用命题 5.4，A 是 $\sum_{i=1}^{n+1} \epsilon_i$-DP 算法. □

接下来，我们说明差分隐私最关键的性质：一旦被差分隐私算法处理过，无论后续如何处理，都不会影响隐私保护的效果.

命题 5.6 (后处理) *令 $A : \mathcal{X}^n \to \mathcal{Y}$, $B : \mathcal{Y} \to \mathcal{Z}$ 为相互独立的随机算法，其中 $\mathcal{X}$，$\mathcal{Y}$，$\mathcal{Z}$ 是任意集合. 如果 A 是 ϵ-DP 算法，那么复合算法 $B(A(\cdot))$ 也是 ϵ-DP 算法.*

证明. 我们仍然只考虑离散情形，采用定义的方法证明

$$\begin{aligned}\Pr(B(A(x)) = b) &= \sum_{y \in \mathcal{Y}} \Pr(A(x) = y) \Pr(B(y) = b) \\ &\le \mathrm{e}^{\epsilon} \sum_{y \in \mathcal{Y}} \Pr(A(x') = y) \Pr(B(y) = b) \\ &= \mathrm{e}^{\epsilon} \Pr(B(A(x')) = b).\end{aligned}$$

□

最后，我们讨论如果有多个人的数据都发生变化的时候，隐私保护的性质会发生什么变化.

命题 5.7 (群体隐私) *令 $x, x' \in \mathcal{X}^n$ 是 k-相邻数据集，$1 \le k \le n$. 如果 A 是 ϵ-DP 算法，那么对所有的值集 E，我们有*

$$\Pr(A(x) \in E) \le \mathrm{e}^{k\epsilon} \Pr(A(x') \in E).$$

证明. 考虑数据集 $x_0, x_1, \cdots, x_k$，其中 $x_0 = x$, $x_k = x'$，且 x_i 和 x_{i+1} 是 1-相邻数据集，$i = 0, \cdots, k-1$. 那么

$$\begin{aligned}\Pr(A(x) \in E) &\le \mathrm{e}^{\epsilon} \Pr(A(x_1) \in E) \le \mathrm{e}^{2\epsilon} \Pr(A(x_2) \in E) \\ &\le \cdots \le \mathrm{e}^{k\epsilon} \Pr(A(x') \in E).\end{aligned}$$

□

换言之，k-相邻数据集上 ϵ-DP 算法的表现仿佛一个 $k\epsilon$-DP 算法.

这一性质还可以推出 ϵ 的含义. 我们知道，数据集 $x, x' \in \mathcal{X}^n$ 最多在 n 个位置不同. 所以对于一个 ϵ-DP 算法 A，一定有

$$\Pr(A(x) \in E) \leq \mathrm{e}^{n\epsilon} \Pr(A(x') \in E).$$

如果 ϵ 太小，这一算法对任何输入都有相似的输出. 换句话说，算法压根没有输出任何有意义的内容. 于是，我们定量说明了，ϵ 还代表信息的泄露量. 因此，一个实用的 DP 算法不能让 ϵ 太小，否则输出没有意义；也不能让 ϵ 太大，否则隐私保护效果不好.

§5.3 差分隐私的应用

在这一部分，我们将会具体讨论三个差分隐私的算法或机制.

§5.3.1 随机反应算法

我们从一个具体场景开始. 假设有一名老师想要调查班上的同学有多少人曾经在考试中作弊. 设班上一共有 n 名同学，每个人的真实答案是一个数字 $x_i \in \{0, 1\}$，0 表示没有作弊，1 表示作弊.

没有人愿意主动承认自己作弊，所以，对于每个 i，独立地按照以下规则根据 x_i 得到对应的 y_i：

$$y_i = \begin{cases} x_i, & \text{以 } 2/3 \text{ 的概率,} \\ 1 - x_i, & \text{以 } 1/3 \text{ 的概率.} \end{cases}$$

然后，老师让每个同学回答 y_i，并公布 $\sum_{i=1}^{n} y_i$.

这的确可以保护隐私：当 $y_i = 1$ 时，学生 i 可以声称这是由于算法的随机机制造成的，而并非自己真的作弊过，因而他愿意诚实回答.

我们称这一算法为*随机反应*（RR）算法，它是 S. L. Warner 在 1965 年提出的（远远早于差分隐私概念的提出 !），被广泛用于调查敏感问题.

以下结论说明了 RR 算法的确是差分隐私算法.

定理 5.1 *RR 算法是* $\log 2$*-DP 算法.*

证明. 记 Y_i 是 y_i 对应的随机变量. 我们知道 y_i 之间相互独立，所以

$$\Pr(A(x) = y) = \prod_{i=1}^{n} \Pr(Y_i = y_i | x_i).$$

对于 y_i，我们有

$$\frac{\Pr(Y_i = y_i | x_i = y_i)}{\Pr(Y_i = y_i | x_i = 1 - y_i)} = \frac{2/3}{1/3} = 2.$$

类似地，我们有

$$\frac{\Pr(Y_i = y_i | x_i = 1 - y_i)}{\Pr(Y_i = y_i | x_i = y_i)} = \frac{1/3}{2/3} = 1/2.$$

所以，对于一对 1-相邻数据集 x, x' 和任意的 $y \in \mathcal{Y}$，假设 $x_j \neq x'_j$，不论 y_j，x_j 和 x'_j 的取值是什么，我们都有

$$\begin{aligned}
&\frac{\Pr(A(x) = y)}{\Pr(A(x') = y)} \\
=&\frac{\prod_{i=1}^n \Pr(Y_i = y_i | x_i)}{\prod_{i=1}^n \Pr(Y_i = y_i | x'_i)} \\
=&\frac{\Pr(Y_j = y_j | x_j)}{\Pr(Y_j = y_j | x'_j)} \leq 2.
\end{aligned}$$

由命题 5.2，RR 算法是 $\log 2$-DP 算法. □

另一方面，我们真正关心的是 $\sum_{i=1}^n x_i$，也就是有多少人作弊. 我们希望 RR 算法的输出能够很好地估计出这一值，也就是 RR 算法得到的 $\sum_{i=1}^n Y_i$ 是否能很好的估计出 $\sum_{i=1}^n x_i$.

为此，假设每个人独立地有 p 的概率作弊，那么从期望上说，作弊的人大概有 np 个，但我们不知道 p. 假设每个人的真正回答是随机变量 Y_i，我们来计算 $\mathbb{E}[\sum_{i=1}^n Y_i]$.

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}[Y_i] = \Pr(Y_i = 1) &= p \cdot \frac{2}{3} + (1 - p) \cdot \frac{1}{3} \\
\implies p &= 3\mathbb{E}[Y_i] - 1.
\end{aligned}$$

对 i 累和，我们有

$$np = 3\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^n Y_i\right] - n.$$

所以，RR 算法的输出 $\sum_{i=1}^n y_i$ 在期望上很好地估计了 $\sum_{i=1}^n x_i$.

§5.3.2 全局灵敏度与 Laplace 机制

RR 算法是如何实现差分隐私的呢？最重要的一步是，它把真实数据加了噪声，但是这一噪声并不会过分地影响结果. 更一般地，我们似乎总是可以通过向输出添加噪声来实现差分隐私. 那么就引出了另一个问题，需要添加多大的噪声？

一个极端是，如果我们添加的噪声太大，那么输出就完全变成随机的了；另一个极端是，我们完全不加噪声，这样就没有隐私保护的效果. 我们希望能够找到一个合适的噪

声水平，使得既能保护隐私，又能保持输出的有用性. 多大的噪声合适，这和算法本身的性质有关，比如，当输入只改变一点时，算法的输出会改变多大？我们定义全局灵敏度来衡量这一性质.

定义 5.3 (全局灵敏度) 给定算法 $f : \mathcal{X}^n \to \mathbb{R}$，定义 f 的**全局灵敏度**为

$$\mathsf{GS}_f = \sup_{x,x' \text{ 在} \mathcal{X}^n \text{ 1-相邻}} |f(x) - f(x')|.$$

定义中的 1-相邻，可能会随着情景不同而改变. 全局灵敏度的定义是很直观的，就是改变一条数据会对算法输出带来的最大可能变化.

我们来计算一个简单的例子.

例 5.1 设 $f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \phi(x_i)$，$\phi : \mathcal{X} \to [0,1]$ 是满射. 那么，

$$\begin{aligned}
\mathsf{GS}_f &= \sup_{x,x' \text{ 在} \mathcal{X}^n \text{ 1-相邻}} |f(x) - f(x')| \\
&= \sup_{x,x' \text{ 在} \mathcal{X}^n \text{ 1-相邻}} \frac{1}{n}\left|\sum_{i=1}^n \phi(x_i) - \sum_{i=1}^n \phi(x_i')\right| \\
&= \sup_{x,x' \text{ 在} \mathcal{X}^n \text{ 只在} j \text{ 不同}} \frac{1}{n}\left|\phi(x_j) - \phi(x_j')\right| = \frac{1}{n}.
\end{aligned}$$ □

接下来，我们试图给出一个一般的方法来构造差分隐私算法. 给定一个数据集 $x \in \mathcal{X}^n$ 和参数 ϵ. 对于一个算法 $f : \mathcal{X}^n \to \mathbb{R}$，我们想要给 f 的输出加一个噪声 Z，使它具有差分隐私的性质. 新得到的算法 A 是一个随机算法，给定数据集 x，它输出

$$A(x) = f(x) + Z.$$

设 x，x' 是两个 1-相邻数据集，记 $\mu = f(x)$，$\mu' = f(x')$. 如果 Z 是连续型随机变量，我们希望密度函数 h_x 和 $h_{x'}$ 满足

$$\frac{h_x(y)}{h_{x'}(y)} \le \mathrm{e}^{\epsilon}.$$

如何选择这样的 Z 呢？注意，$A(x)$ 和 $A(x')$ 的只差一个常数 $\mu - \mu'$，所以密度函数 h_x 和 $h_{x'}$ 应该是关于 y 的平移，也就是

$$h_x(y) = h_{x'}(y - (\mu - \mu')).$$

因为我们想要构造 e^{ϵ}，所以不妨设想 Z 的密度函数具有指数 e^{-x} 的形式[2]，我们就会有

$$\frac{h_x(y)}{h_{x'}(y)} = \frac{h_{x'}(y - (\mu - \mu'))}{h_{x'}(y)} = \mathrm{e}^{(\mu - \mu')}.$$

[2]在此时，我们先不管它是不是密度函数，而是看如何才能够造出来差分隐私算法.

如果我们想要 ϵ-DP，那么我们就需要让 Z 的扰动不要太大. 如果用 αZ 来替代 Z，那么

$$\frac{h_x(y)}{h_{x'}(y)} = \mathrm{e}^{\alpha(\mu-\mu')}.$$

注意到，$|\mu - \mu'| \le \mathsf{GS}_f$，所以我们需要 $\alpha \le \epsilon/\mathsf{GS}_f$.

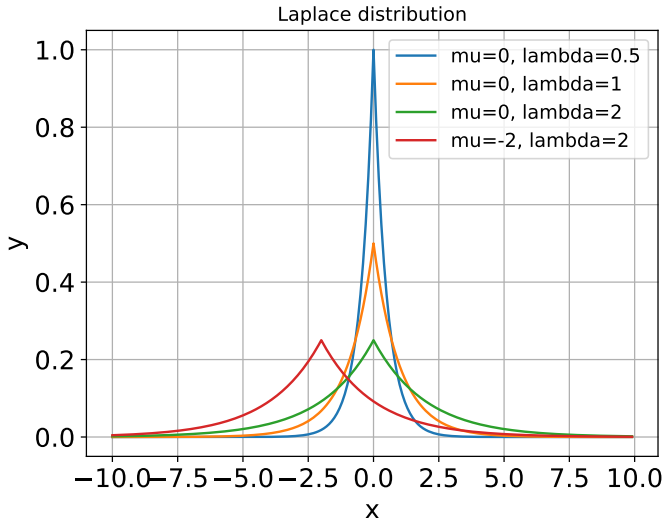
以上推导过程虽然不是严格的，但是它给出了我们构造差分隐私算法的一个思路，这一思路的最终结果为 *Laplace 机制*. 首先引入 Laplace 分布的概念.

定义 5.4 (Laplace 分布) 给定参数 $\mu \in \mathbb{R}$ 和 $\lambda > 0$，定义概率密度函数

$$h(x|\mu,\lambda) = \frac{1}{2\lambda}\exp\left(-\frac{|x-\mu|}{\lambda}\right).$$

我们称具有这一密度的分布为 *Laplace 分布*，记为 $\mathsf{Lap}(\mu,\lambda)$.

Laplace 分布是服从双边指数分布的随机变量进行线性变换后服从的分布. 具体来说，设 $X \sim \mathsf{DExp}(1)$，那么 $\lambda X + \mu \sim \mathsf{Lap}(\mu,\lambda)$. 在图 5.1 中，我们展示了不同参数的 Laplace 分布密度函数图像. 更多关于 Laplace 分布的性质，我们留做习题. [lhy: 习题]



[lhy: 重画]

图 5.1: Laplace 分布的密度函数图像

下面我们来陈述 Laplace 机制.

- 给定算法 $f : \mathcal{X}^n \to \mathbb{R}$，参数 $\epsilon > 0$.

- 计算全局灵敏度 GS_f.
- 构造随机算法 $A_{\mathsf{Lap}}(x;\epsilon) = f(x) + Z$，其中 $Z \sim \mathsf{Lap}(0, \mathsf{GS}_f/\epsilon)$.

如此，我们就得到了一个随机算法 A_{Lap}.

定理 5.2 *对于任意的 $\epsilon > 0$，A_{Lap} 是 ϵ-DP 算法.*

证明. 设 x，x' 是两个 1-相邻数据集，记 $\mu = f(x)$，$\mu' = f(x')$. 由 Laplace 分布的性质可知，$A_{\mathsf{Lap}}(\epsilon, x) \sim \mathsf{Lap}(\mu, GS_f/\epsilon)$，$A_{\mathsf{Lap}}(\epsilon, x') \sim \mathsf{Lap}(\mu', GS_f/\epsilon)$.

因此，对于任意的 $y \in \mathcal{Y}$，有

$$\begin{aligned}\frac{h_x(y)}{h_{x'}(y)} &= \exp\left(-\epsilon\frac{|\mu - y| - |\mu' - y|}{GS_f}\right)\\ &\le \exp\left(\epsilon\frac{|\mu - \mu'|}{GS_f}\right) \le \exp(\epsilon).\end{aligned}$$

根据命题 5.3，命题得证. □

§5.3.3 DP 版本 Llyod 算法

作为一个 Laplace 机制的具体实例，我们将 k-均值聚类问题的经典算法 Llyod 算法改造成一个差分隐私算法.

k-均值聚类问题指的是给定一个数据集 x，找到 k 个点（中心）$\{c_i\} \subseteq \mathbb{R}^d$，使得 $\sum_{i\in[n]} \min_{j\in[k]} \left\|x_i - c_j\right\|^2$ 最小. 通俗来说，就是找到 k 个中心，使得数据集中每个点到最近的中心的距离之和最小.

在我们开始讨论算法和改造之前，我们先要理解为什么 k-均值问题需要差分隐私. 我们可以把每一个点看作一个人的数据，而中心看作是一个数据集的平均特征. 我们只希望算法可以知道数据的平均特征，而不希望泄露某个个人的数据. 因此，我们希望 k-均值算法是差分隐私的.

k-均值问题最常见的解决方法是使用迭代的启发式的 *Lloyd 算法*，其表述为下：

- 输入：数据集 $x \in \mathcal{X}^n$，这里 $\mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x\|_1 \le 1\}$，参数 k，最大迭代次数 T.
- 随机初始化 $c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \cdots, c_k^{(0)} \in \mathcal{X}$.
- for $t = 1$ to T
  - for $j = 1$ to k

    * 计算 $S_j = \{i : c_j^{(t-1)}$ 是 x_i 最近的中心$\}$.
    * 计算 $n_j = |S_j|$.
    * 计算 $a_j = \sum_{i \in S_j} x_i$.
    * 更新 $c_j^{(t)} = a_j / n_j$.
- 输出：$c_1^{(T)}, c_2^{(T)}, \cdots, c_k^{(T)}$.

这一算法的思路大致是：首先随机初始化 k 个中心 c_i，然后，对每一个 c_i，找到离它最近的那些点，以这些点的平均值（也就是质心）作为新的 c_i，重复这一过程直到收敛.

注意，如果初始化的中心就是各个质心，那么 Llyod 算法就已经找到最优解了. 事实上，可以证明，Llyod 算法最终会收敛到最优解.

尽管 Llyod 算法可以达到很好的效果，但它并不能保证 DP 性质. 我们希望对这一算法进行小规模的修改，让它具有 ϵ-DP 的性质. 我们给出如下的 DP 版本 Llyod 算法.

- 输入：数据集 $x \in \mathcal{X}^n$，这里 $\mathcal{X} = \{x \in \mathbb{R}^d : \|x\|_1 \leq 1\}$，参数 k，最大迭代次数 T，参数 ϵ.
- $\epsilon' = \frac{\epsilon}{2T}$，随机初始化 $c_1^{(0)}, c_2^{(0)}, \cdots, c_k^{(0)} \in \mathcal{X}$.
- for $t = 1$ to T
  - for $j = 1$ to k
    * 计算 $S_j = \{i : c_j^{(t-1)}$ 是x_i 最近的中心$\}$.
    * $n_j = |S_j|$.
    * $a_j = \sum_{i \in S_j} x_i$.
    * 计算 $\hat{n}_j = n_j + Y$，$Y \sim \mathsf{Lap}(0, 2/\epsilon')$.
    * 计算 $\hat{a}_j = a_j + (Z_1, \cdots, Z_d)$，$Z_i$ i.i.d. $\sim \mathsf{Lap}(0, 2/\epsilon')$.
    * 更新 $c_j^{(t)} = \begin{cases} \hat{a}_j / \hat{n}_j, & \hat{n}_j \geq 1, \\ \mathcal{X} \text{ 上的一个随机均匀采样}, & \hat{n}_j < 1. \end{cases}$
- 输出：$c_1^{(T)}, c_2^{(T)}, \cdots, c_k^{(T)}$.

简单来说，我们对原来 Llyod 算法中产生的中间值都是用 Laplace 机制来加噪声，最终得到的中心也是加了噪声的. 以下定理表明上面的算法确实是一个 ϵ-DP 算法.

定理 5.3 *DP 版本的 Lloyd 算法是 ϵ-DP 算法.*

证明. (证明概要) 我们只在这里陈述证明的大致想法，将细节留到习题[lhy: 习题].

首先，作为一个迭代算法，我们可以把每轮迭代看成一次算法 A_t 的执行，而整个算法是这些算法的复合，整个算法一共有 T 次复合. 由命题 5.5，我们只需要证明每一轮迭代是 (ϵ/T)-DP 算法，那么整个算法就是 ϵ-DP 算法.

进一步，考虑证明每一个 A_t 是 (ϵ/T)-DP 算法. 每一个 A_t 内部都是 k 个独立的 Laplace 机制，实际上是一个输入为 n_j, a_j，输出为 $\hat{n}_j$，$\hat{a}_j$ 的算法. 所以，只需要证明：每一个独立 Laplace 机制确实是 (ϵ/T)-DP，然后再证明这些独立的 Laplace 机制总和的效果依然是 (ϵ/T)-DP，我们就可以证明整个命题. □

§5.4 习题

§5.5 章末注记

第三部分

决策与优化

第六章　凸分析

本章将会建立关于决策与优化的基本理论，这些方法论都是数据驱动的机器学习的基础，他们涉及从数据到建立模型的步骤（即训练）. 优化与分析有着密不可分的联系，所以本章我们会立足优化问题的一些基本事实，建立凸分析理论. 凸分析是优化理论的基础.

§6.1　决策与优化的基本原理

§6.1.1　统计决策理论

[lhy: 这部分要细化]

我们在前一部分讨论过，数据（或者说信息）的意义总是体现在集合的对象中，我们把我们所关心的集合对象称为（随机）*总体* P. 从概率论角度看，总体就是一个概率分布. 现在我们从总体 P 中抽取一个*样本* X. 这件事情在概率论上意味着我们得到了一个随机变量 X 服从分布 P. 拿到样本之后，我们的任务是做出*好的决策*，因此，决策 T 是一个依赖 X 的函数. 比如说，P 是所有大学生的身高，X 是随机抽选一个人测量的身高，我们的决策 T 是估计大学生的平均身高.

“好的决策”指的是函数 T 能够具备某些量化指标. 其中非常常用的一个方法是通过*损失函数*来衡量，它是总体 P 和决策 $T(X)$ 的函数，即 $L(P,T(X))$. 损失函数在不同语境下有不同称呼. *损失函数*是机器学习和数理统计语境下常用的称呼. 在控制理论中以及机器学习中，它被称为*代价函数*. 在经济学和金融学的风险理论中，损失函数被称为*风险函数*，它意味着个体在面对不确定的环境下所需要面对的风险. 而在优化理论中，损失函数往往被称为*目标函数*，表明所要优化的对象.

决策 T 的一种量化指标是最小化期望意义下的损失函数：

$$\min_T \mathbb{E}_{X\sim P}(L(P,T(X))).$$

在经济学中，这一量化指标实际上是 von Neumann 和 Morgenstern *期望效用理论*的具体体现. 这一理论认为，个体在面对不确定的环境时，会选择最大化期望效用的决策；在风险理论的语境下，则是最小化期望风险的的决策.

现在我们考虑一个非常一般的决策任务. 假设我们的任务是估计函数 f，但是我们只知道观测到的自变量 X（来自总体 P）以及它的函数值 $Y = f(X)$，我们的决策是函数的估计值 $\hat{f}$. 在机器学习中，f 通常是需要训练的模型. 我们可以写出若干种损失函数：

- 平方（L^2）损失函数：$L(P, T(X)) = (Y - \hat{f}(X))^2$. 使用此损失函数的时候，我们要假定 f 在实数范围取值.
- L^1 损失函数：$L(P, T(X)) = |Y - \hat{f}(X)|$. 使用此损失函数的时候，我们要假定 f 在实数范围取值.
- SVM 损失函数（hinge 损失函数）：$L(P, T(X)) = \max\{0, 1 - Y \cdot \hat{f}(X)\}$. 使用此损失函数的时候，我们一般要假定 $f(X) \in [-1, 1]$.
- 交叉熵损失函数：$L(P, T(X)) = CH(\hat{f}(X), Y)$.

这些损失函数会用在不同的场景之中. 通常来说，机器学习中有两类问题：*回归问题*和*分类问题*和. 他们两个的区别主要在于回归问题中 f 取值为实数，而且通常随自变量连续变化；而分类问题中 f 只取有限多个值，他们通常被作为标签（比如这张图片是人还是青蛙）使用. 在回归问题中，我们通常使用平方损失函数或者 L^1 损失函数；在分类问题中，我们通常使用 SVM 损失函数或者交叉熵损失函数.

§6.1.2 优化问题

现在我们从决策过渡到优化. 在最简单的决策问题中，我们的目标就是找到某个 x 使得（期望）损失函数 f 最小. 此时，问题的一般形式为：

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & f_i(x) = 0, \quad i = 1, \dots, m, \\ & g_j(x) \le 0, \quad j = 1, \dots, n, \\ & x \in \Omega. \end{aligned}$$

这里，s.t（subject to）之后的内容表明了 x 取值的限制，因此被称为*约束*. 其中 $f_i(x) = 0$ 和 $g_j(x) \le 0$ 被称为*函数约束*，而 $x \in \Omega$ 被称为*集合约束*.

优化的基本任务就是找到 x 最小化损失函数.

根据损失函数 f、约束条件 f_i 和 g_j 的不同性质，我们可以对优化问题进行分类：

- 无约束优化：约束条件 f_i 和 g_j 实际上不存在，即 $m = n = 0$，并且 Ω 是全空间，比如 $\mathbb{R}^n$.
- 有约束优化：至少存在一个约束条件，即 $\min\{m, n\} \geq 1$，或者 Ω 不是全空间.
- 光滑优化：损失函数和约束条件都是可微函数.[1]
- 线性优化：损失函数和约束条件都是线性函数（形如 $a^\mathsf{T} x + b$）.

> **注.** [lhy: 介绍一下控制理论与优化理论的异同，特别是连续控制和随机优化.]

下面我们看几个经典的优化例子.

例 6.1 (最小二乘法) 给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和向量 $b \in \mathbb{R}^m$，考虑如下优化问题：

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \|Ax - b\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & x \in \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

这个问题被称为**最小二乘法**. 目标函数可以被写为 $(Ax-b)^\mathsf{T}(Ax-b)$，因此最小二乘法是一种典型的无约束光滑优化问题.

最小二乘法的解 x^* 实际上是投影解：b 的行向量投影到 A 的列向量形成的线性空间，正好是 Ax^*. [lhy: 加个图，补全细节] 因此，求投影也可以被写作一个优化问题. □

例 6.2 (线性规划) 给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和向量 $b \in \mathbb{R}^m$，考虑如下优化问题：

$$\begin{aligned} \min_x \quad & c^\mathsf{T} x \\ \text{s.t.} \quad & Ax \leq b, \\ & x \geq 0. \end{aligned}$$

这个问题被称为**线性规划**. 目标函数和约束条件都是线性的，因此线性规划是一种典型的线性优化问题. [lhy: 加个图，补全细节] □

上面两个例子远远不能覆盖所有的优化问题，实际上，相当多的运筹学、机器学习和计算机科学中的问题都可以被视作（非线性）优化问题.

- 运筹学：线性规划、二次规划、整数规划、网络流问题、组合优化问题等.

[1] 光滑这一词的含义在不同的文献中大相径庭，它可以指（连续）可微、连续可微、二次（连续）可微或者无穷次可微.

- 金融学：投资组合优化、风险控制等.
- 机器学习：模型的训练.
- 计算机科学：图论中的极值问题，例如最短路径问题、最小生成树问题等.

因此，如果有一个能够解决通用优化问题的灵丹妙药，那么将会有极其重大的意义. 然而我们后面将会看到，一般的优化是一个难解的问题，更严谨一点说，不存在通用高效算法.

我们先需要明确解优化问题的算法到底是什么. 我们通过给出算法的一些特征来最终明确这一点. 大部分优化算法都用了**迭代法**的思想：算法 A 接受一个自变量 x，输出一个自变量 $A(x)$，并把它作为下一轮的输入. 此外，一个算法还应该具有**通用性**，即它必须要能解决一类优化问题 F. 然后，算法具备通用性就意味着它在进行**黑箱优化**：F 必须要给算法提供必要的信息来完成求解，我们将这样的提供机制抽象为**先知**，记为 $\mathcal{O}$. 具体来说算法输入 x 给 $\mathcal{O}$，$\mathcal{O}$ 返回一些信息给算法（例如 x 处的函数值、导数值、Hessian 矩阵）.

接下来的问题是衡量优化算法的性能好坏. 我们关注的是*最坏情况*，也就是说假如我们关注的是问题类 $P \subseteq F$，那么，我们要看的是优化算法在 P 中最差的表现如何. 衡量优化算法性能的指标有以下几个：

- *近似程度*：我们需要求在允许误差 ϵ 的情况下的近似解. 例如，函数值不大于最优值的 ϵ，或者离最优点距离不超过 ϵ. 考虑近似解是优化问题非常重要的一个想法，因为计算机的表示精度是有限的，我们不可能在所有情况下都求出精确解，所以求近似解是合理的要求.
- *运行时间（收敛速度，复杂度）*：找到目标近似解需要调用先知的次数. 通常来说，运行时间会随近似度要求变高而变长，因此运行时间是一个关于近似程度的函数.

> **注.** 通常来说，优化算法的执行过程中还会进行除了调用先知之外的操作，例如进行加减乘除. 然而，如果我们把所有这些操作都算入复杂度之中，算法的分析会变得非常困难，因此我们通常只考虑调用先知的次数. 这样做的合理性在于，每一次的加减乘除等额外操作，几乎都是因为调用一次先知所以才进行的，因此我们可以把这些额外操作的时间都算入先知调用的时间之中.

有了上面这些准备，我们就可以将“没有万能算法”这一陈述写成定理了.

定理 6.1 (没有免费午餐定理) *[lhy: 给一个证明，以及更加严格的表述]* 设 F 是有限个优化问题的集合，F 上有一个任意的概率分布. 考虑一个 F 上的优化算法，记号 d_t 表示 t 轮迭代之后算法产生的点列

$$(x_t(1), y_t(1)), \ldots, (x_t(t), y_t(t)).$$

给定迭代轮数 t，优化问题 f，算法 A，优化过程所产生的点列概率分布为 $P(d_t|f,t,A)$. 那么，对任意优化算法 A_1, A_2，

$$\sum_{f\in F} P(d_t|f,t,A_1) = \sum_{f\in F} P(d_t|f,t,A_2).$$

这一定理意味着，对特定的点列，任何算法在所有实例上产生它的概率总和是一样的.

那么，点列和“没有万能算法”有什么样的关系呢？实际上，衡量算法性能的指标和点列有非常密切的联系. 比如说，算法花了 k 步找到一个 ϵ-近似解，用点列的语言来说就是算法迭代产生的点列，长度至多是 k 并且最后一个点距离最优解距离不大于 ϵ. 粗略地说，任意点列成立的性质意味着任意指标成立的性质. 因此，对于任何一类优化问题来说，不论以何种指标来衡量性能，优化算法在某些问题上表现出来的突出性能一定会在另一些问题上被抵消. 没有一个万能的算法可以高效解决所有优化问题！

§6.1.3 例子：网格搜索算法

前面对于概念的讨论依然非常抽象，所以下面我们看一个具体的例子，这个例子将会展示从算法分析的角度，优化所关注的主要问题. 考虑如下优化问题：

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in [0,1]^n. \end{aligned} \tag{6.1}$$

其中 $f(x)$ 是 Lipschitz 连续函数，即它满足

$$|f(x) - f(y)| \le L \|x - y\|_\infty, \quad \forall x, y \in [0,1]^n.$$

关于优化算法的假设如下. 首先，我们可以访问**零阶先知**，即 $\mathcal{O}(x) = f(x)$. 其次，优化算法需要去找到 **ϵ-近似解**，即函数值至多比最小值大 ϵ 的解.

> **注.** 在优化中，我们会经常使用词语“零阶”“一阶”等等，所谓的“阶”指的是函数导数阶数，零阶先知指的是我们可以访问函数值，一阶先知指的是我们可以访问一阶导数，以此类推. 后面还会有零阶条件、一阶条件等等，他们的含义类似.

我们考虑一个非常简单的算法，他被称为网格搜索：

- 将 $[0,1]$ 等分成 p 份，$[0,1] = [0,1/p] \cup \ldots [(p-1)/p, 1]$.
- 遍历 $(p+1)^n$ 个格点：

$$x_{(i_1,\ldots,i_n)} = \left(\frac{i_1}{p}, \ldots, \frac{i_n}{p}\right)^{\mathsf{T}},$$

  $i_k \in \{0,1,\ldots,p\}$.
- 对每个格点询问先知得到其函数值，输出函数值最小的一个（记为 $(\bar{x}, f(\bar{x}))$）.

我们对于网格搜索算法问的问题是，它的复杂度如何. 也就是说，它需要调用先知多少次才能找到一个 ϵ-近似解？我们从一个引理开始.

引理 6.1 *设 (6.1) 的最优值为 f^*，那么*

$$f(\bar{x}) - f^* \leq \frac{L}{2p}.$$

证明. 设 x^* 是最优点，存在一个方格包含 x^*：

$$x_{(i_1,\ldots,i_n)} \leq x^* \leq x_{(i_1+1,\ldots,i_n+1)}.$$

这个方格的长为 $1/p$，所以我们可以选取方格的某个顶点 $\hat{x}$，使得它的每一个轴离 x^* 的距离都不超过 $1/(2p)$.[lhy: 画个图]

于是根据 Lipschitz 条件，

$$f(\bar{x}) - f^* \leq f(\hat{x}) - f(x^*) \leq L \|\hat{x} - x^*\|_\infty \leq \frac{L}{2p}.$$ □

利用这个引理，我们可以证明网格搜索算法的复杂度.

定理 6.2 *网格搜索算法可以找到找到一个 ϵ-近似解，其调用 $\mathcal{O}$ 的次数至多为*

$$\left(\left\lfloor \frac{L}{2\epsilon} \right\rfloor + 2\right)^n.$$

- 证明：取 $p = \lfloor L/(2\epsilon) \rfloor + 1$，代入引理 6.1 即可.

网格搜索法的运行时间给了优化问题 (6.1) 一个求解时间的**上界**. 然而这个上界维数呈指数关系，通常来说都是不可接受的复杂度. (6.1) 会有更好的算法呢？这就是**下界问题**. 令人惊讶的是，对于这一个问题，我们可以证明网格搜索法是渐近意义下最优的！

定理 6.3 设 $\epsilon < L/2$，任何访问 $\mathcal{O}$ 的算法（零阶算法）找到 (6.1) 的 ϵ-近似解至少需要调用 $\mathcal{O}$

$$\left\lfloor \frac{L}{2\epsilon} \right\rfloor^n$$

次.*[lhy: 改一下表述，看不懂]*

证明. 设 $p = \lfloor L/(2\epsilon) \rfloor$，对任意算法 A，我们尝试构造一个函数，使得 A 调用 $\mathcal{O}$ p^n 次时最多找到一个 ϵ-近似解.

构造思路：对任何测试点，使得 $\mathcal{O}$ 总是返回 0，于是，算法 A 只能找到 $f = 0$ 的解 $\bar{x}$. 注意到算法只能根据先知的返回来进行操作，因此我们先假定这样的函数存在. [lhy: 改一下，读不懂].

根据鸽巢原理，网格中至少有一个长为 $1/p$ 的小方格 B 内部没有包含任何测试点. 假设这个小方格的中心是 x^*，构造 $\bar{f}(x) = \min\{0, L\|x - x^*\|_\infty - \epsilon\}$. 容易看出，$\bar{f}$ 是 L-Lipschitz 函数，并且最小值为 $-\epsilon$.

函数 $\bar{f}$ 非零的点只在方格 $B' = \{x \in [0,1]^n : \|x - x^*\|_\infty \le \epsilon/L\}$ 内部. 因为 $1/(2p) \ge \epsilon/L$，所以 $B' \subseteq B$. 所以所有测试点上 $\mathcal{O}$ 都会返回 0，这是一个 ϵ-近似解. 因此 A 通过小于 p^n 次对 $\mathcal{O}$ 的调用最多只能找到 ϵ-近似解. □

以上两个结论分别给出了 (6.1) 问题的上下界，对比他们：

问题的上界：	问题的下界：
$\left(\left\lfloor \frac{L}{2\epsilon} \right\rfloor + 2\right)^n$	$\left\lfloor \frac{L}{2\epsilon} \right\rfloor^n$

尽管网格搜索是一个很慢的算法，但是我们证明了，在渐近意义下，优化问题 (6.1) 的最优算法就是网格搜索！因此，我们可以说，一般的优化问题是难解的.

当我们聚焦在特定的问题类上，优化问题并不一定是难解的. 比如，线性规划可以在关于约束个数和变量个数的多项式时间内解出精确解. 然而，现实中大部分重要的问题并不是线性的，因此，我们接下来的关键问题是识别出一类可以快速求解的非线性优化问题，这就是凸函数的意义.

§6.2 凸函数

我们首先看无约束优化，看看什么样的损失函数可以快速求最小值. **梯度下降方法**是最古老也最常用的方法. 梯度下降每步计算函数的导数（梯度），然后朝着负梯度方向移动到下一个点. 与梯度下降算法相关的最小值必要条件是一阶条件.

定理 6.4 (一阶条件) *如果 x^* 是可微函数 f 的局部最小值，那么*

$$f'(x^*) = 0.$$

证明. 根据局部最小值的定义，存在 $r > 0$，对于任意 $\|y - x^*\| < r$，$f(y) \geq f(x^*)$. 因此 $f(y) = f(x^*) + \langle f'(x^*), y - x^* \rangle + o(\|y - x^*\|) \geq f(x^*)$. 因此，对任意 $s \in \mathbb{R}^n$，$\langle f'(x^*), s \rangle \geq 0$. 考虑方向 s 和 $-s$ 可得 $\langle f'(x^*), s \rangle = 0$. 由 s 的任意性，$f'(x^*) = 0$. □

现在，从一阶条件出发，我们考虑如下优化函数类 $\mathcal{F}$，满足如下三个假设：

- 假设 1：对任意 $f \in \mathcal{F}$，如果 x 满足一阶条件，那么 x 是 f 的全局最小值点.
- 假设 2：对任意 $f, g \in \mathcal{F}$，$\alpha, \beta \geq 0$，$\alpha f + \beta g \in \mathcal{F}$.
- 假设 3：线性函数 $f(x) = \langle \alpha, x \rangle + b \in \mathcal{F}$.

假设 1 使得利用一阶条件的算法可以找到全局最优解. 假设 2 描述了对 $\mathcal{F}$ 封闭的操作，这样的操作实际上就是要求函数对线性组合封闭. 要求系数 α 和 β 非负是为了保证一阶条件得到的确实是最小值而不是最大值. 一个例子是，如果 $x^2 \in \mathcal{F}$，并且线性组合不限制非负系数，那么 $-x^2 \in \mathcal{F}$，但是后者一阶条件对应的是最大值而非最小值，这就会与假设 1 矛盾. 假设 3 提供了 $\mathcal{F}$ 的基本函数，即线性函数. 我们之前说过，线性规划是易解的，所以 $\mathcal{F}$ 至少要包含线性函数.

从这三个假设出发，我们可以给出函数类 $\mathcal{F}$ 的刻画.

固定一个函数 $f \in \mathcal{F}$，一个点 $x \in \mathbb{R}^n$，定义 $\phi(y) = f(y) - \langle f'(x), y \rangle$. 根据假设 2 和假设 3，$\phi(y) \in \mathcal{F}$. $\phi'(y)|_{y=x} = f'(x) - f'(x) = 0$，根据假设 1，$x$ 是 ϕ 的全局最小值. 因此，$\phi(y) \geq \phi(x)$，即

$$f(y) \geq f(x) + \langle f'(x), y - x \rangle . \tag{6.2}$$

这一不等式给出了**可微凸函数**的定义：任意 x, y 都满足 (6.2) 的函数. 这一不等式有很强的几何直观，从 x 处做函数 f 的切线，那么切线上的点都在函数下方. 从这个角度来看，凸函数的定义是向下凸的函数. [lhy: 画个图]

非常有趣的是，$\mathcal{F}$ 完全由可微凸函数组成，这一点可以通过下面的定理得到证明.

定理 6.5 *函数 $f \in \mathcal{F}$ 当且仅当 f 是可微凸函数.*

证明. 只需验证满足 (6.2) 的函数属于 $\mathcal{F}$.

- 假设 1 令 $f'(x) = 0$ 即得任意 y 都有 $f(y) \geq f(x)$.

- 假设 2 利用内积的双线性性和导数加法公式.
- 假设 3 是平凡的. □

[lhy: 习题：如果 f 是二次可微的，那么他的二阶导数（Hessian 矩阵）$f''(x)$ 和凸函数有何关系？]

[lhy: 给一些凸函数的例子]

从数学的角度来说，给了凸性的定义，下一步任务就是给出保持凸性不变的操作，这样我们可以用基本函数构造出更多的函数.

假设 2 实际上已经给出了一种凸性不变的操作，我们将它写成以下命题：

命题 6.1 *对任意 $f,g \in \mathcal{F}$，$\alpha,\beta \geq 0$，$\alpha f + \beta g \in \mathcal{F}$.*

另一个可以保持凸性的操作是仿射变换可以保持凸性. 所谓仿射变换，指的是向量空间 $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}^m$ 的映射 $x \mapsto Ax + b$，其中 A 是 $m \times n$ 矩阵，$b \in \mathbb{R}^m$. 仿射变换实际上就是线性函数，只是我们用变换的方式来表示它.

命题 6.2 *假设函数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 属于 $\mathcal{F}$，那么对任意仿射变换 $x \mapsto Ax + b$，$g(x) = f(Ax + b) \in \mathcal{F}$.*

证明. $g'(x) = A^\mathsf{T} f'(Ax + b)$，因此

$$\begin{aligned} g(y) = f(Ay + b) &\geq f(Ax + b) + \langle f'(Ax + b), (Ay + b) - (Ax + b) \rangle \\ &= f(Ax + b) + \langle f'(Ax + b), A(y - x) \rangle \\ &= g(x) + \left\langle A^\mathsf{T} f'(Ax + b), y - x \right\rangle \\ &= g(x) + \langle g'(x), y - x \rangle . \end{aligned}$$

□

更多保持凸性不变的操作，见习题. [lhy: 习题：给出更多保持凸性不变的操作]

凸函数的一个重要性质是 Jensen 不等式：

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha) f(y). \tag{6.3}$$

Jensen 不等式具有很强的几何解释：画一条 f 的割线，那么 f 的函数图像位于割线上方. 实际上，Jensen 不等式给了凸函数一种等价的定义：

定理 6.6 *设 f 是连续可微的函数，那么 f 满足 (6.2) 当且仅当 f 满足 (6.3).*

证明. $\Longrightarrow$：在 (6.2) 中，取 x 为 $\alpha x+(1-\alpha)y$，y 分别取为 x 和 y，如此得到两个不等式，加权求和即得 (6.3).

$\Longleftarrow$：$f(y) \geq (1-\alpha)^{-1}(f(\alpha x+(1-\alpha)y)-\alpha f(x))$

$$= f(x)+(1-\alpha)^{-1}(f(x+(1-\alpha)(y-x))-f(x)).$$

令 $\alpha \to 1$ 即得 (6.2). □

如果函数 f 不是可微的，那么定理 6.6 给了一个凸函数更加本质的定义：

定义 6.1 (凸函数) 函数 f 满足对任意 x,y 成立(6.3)，那么称 f 是**凸函数**.

扩展定义之后的凸函数包括了我们之前讲的 L^p（$p=1,2$）损失和 SVM 损失，以及机器学习中用到的大部分损失函数. 在实际情况中，凸函数是一类存在快速收敛算法的函数，例如梯度下降和 Netwon 迭代法. 因此，我们可以说，凸函数类划定了非线性优化中可以快速求解的函数类. 自此，凸性成为了优化中的核心概念，正如 R.T.Rockafellar [?] 所说：

> In fact the great watershed in optimization isn't between linearity and nonlinearity, but convexity and nonconvexity.

§6.3 凸集

接下来我们考虑约束优化问题：

$$\begin{aligned} \min_{x} \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & x \in \Omega. \end{aligned}$$

一个自然的问题是，什么样 Ω 会存在快速收敛的算法？我们将看到，凸集将会是这个问题的答案.

§6.3.1 基本定义和性质

回忆凸函数的一般定义：任意 $\alpha \in [0,1]$ 和 $x,y \in \mathbb{R}^n$，

$$f(\alpha x+(1-\alpha)y) \leq \alpha f(x)+(1-\alpha)f(y).$$

这里，我们隐含的要求是线段 xy 上的每一点都可以求函数值. 因此，如果我们希望凸函数能够包含在带约束的优化中，一个自然的要求就是对任意 $x,y \in \Omega$，线段 $xy \subseteq \Omega$. 这就是凸集的定义：

定义 6.2 (凸集) 集合 C 被称为**凸集**当且仅当对任意 $x, y \in C$，线段 $\{\alpha x + (1-\alpha)y : \alpha \in [0,1]\} \subseteq C$.

我们来看一些凸集的例子：

例 6.3

- 超平面：$\{x \in \mathbb{R}^n : a^\top x = b\}$，$a \in \mathbb{R}^n$，$b \in \mathbb{R}$.
- 半空间：$\{x \in \mathbb{R}^n : a^\top x \geq b\}$，$a \in \mathbb{R}^n$，$b \in \mathbb{R}$.
- 球：$\{x \in \mathbb{R}^n : \|x - x_0\| \leq r\}$，其中 $\|\cdot\|$ 是任意一种范数.
- 锥：C 是一个锥指的是任意 $x, y \in C$ 和任意 $\alpha, \beta \geq 0$，$\alpha x + \beta y \in C$.

另外一些重要的例子是凸函数诱导的凸集. 首先是上图.

定义 6.3 (上图) 函数 f 的**上图**是指集合 $\mathrm{epi}(f) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} : y \geq f(x)\}$. 直观上说，$\mathrm{epi}(f)$ 是位于函数 f 的图像上方的区域.

[lhy: 画图]

上图揭示了凸集与凸函数的关系：

定理 6.7 *上图 $\mathrm{epi}(f)$ 是凸集当且仅当 f 是凸函数.*

证明. $\Longrightarrow$：$(x, f(x)), (y, f(y)) \in \mathrm{epi}(f)$，因此 $(\alpha x + (1-\alpha)y, \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y)) \in \mathrm{epi}(f)$，所以 $\alpha f(x) + (1-\alpha)f(y) \geq f(\alpha x + (1-\alpha)y)$.

$\Longleftarrow$：取 $(x_1, y_1), (x_2, y_2) \in \mathrm{epi}(f)$，得到 $f(\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2) \leq \alpha f(x_1) + (1-\alpha)f(x_2) \leq \alpha y_1 + (1-\alpha)y_2$，所以 $(\alpha x_1 + (1-\alpha)x_2, \alpha y_1 + (1-\alpha)y_2) \in \mathrm{epi}(f)$. □

然后是下水平集.

定义 6.4 (下水平集) 给定 $t \in \mathbb{R}$，函数 f 的**下水平集**是指集合 $C_t(f) = \{x \in \mathbb{R}^n : f(x) \leq t\}$. 直观上说，下水平集是函数值小于 t 的区域.

命题 6.3 *如果函数 f 是凸函数，那么对任意 $t \in \mathbb{R}$，下水平集 $C_t(f)$ 是凸集.*

这个命题的证明是直接的，我们留做习题. 值得注意的是，这一命题的逆命题是不成立的，我们也在习题中讨论. [lhy: 习题：证明命题 6.3]

接下来，我们研究凸集的性质. 根据定义，直接有：

命题 6.4 *凸集的任意交依然是凸集.*

我们可以利用这个性质来构造新的凸集.

例 6.4 • 仿射空间：有限个超平面的交，等价地写作 $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax = b\}$，$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$b \in \mathbb{R}^m$.

- 多面体：有限个半空间的交，等价地写作 $\{x \in \mathbb{R}^n : Ax \le b\}$，$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$b \in \mathbb{R}^m$.
- 单纯形：$\Delta_n = \{x \in \mathbb{R}^n : x_1 + \cdots + x_n = 1, x_i \ge 0, \forall i\}$，是一种特殊的多面体.
- 凸包：给定任意集合 S，可以定义包含它的最小凸集：

$$\bigcap_{S\subseteq C \text{ 是凸的}} C.$$

□

从优化的角度来看，凸集本身具有*最优近似性质*. 我们之前在例 6.1 讨论过，求点到线性空间的投影是一个优化问题. 任何一个点都可以唯一地投影到线性空间的某个点上，因此整个空间通过投影就被近似到了一个线性子空间中.

现在我们来推广这一考虑. 给定任意非空集合 $C \subseteq \mathbb{R}^n$，我们尝试将整个空间近似到集合 C 中. 定义点 x 到 C 的距离为：$d(x, C) = \inf_{p\in C} \|x - p\|_2$. 如果存在 $p \in C$ 达到了距离 $d(x, C)$，我们就说 p 是 x 在 C 上的一个*投影*. 到当 C 就是线性空间的时候，这个定义恰好也是原来投影的定义.

如果 $\mathbb{R}^n$ 中的每个点都在 C 中有唯一的投影，那么就称 C 是 **Chebyshev 集**. C 是 Chebyshev 集意味着 C 是整个空间的一个好的近似. 我们有如下定理：

定理 6.8 *在 $\mathbb{R}^n$ 中，C 是 Chebyshev 集当且仅当 C 是闭凸集.*

这一定理的证明非常复杂，我们留做习题. [lhy: 习题：证明上述定理]

因此，闭凸集是唯一具有良好近似性质的集合类，这又一次从优化角度说明了凸性的重要性.

§6.3.2 分离超平面定理

[lhy: 扩展这部分内容，把 Banach-Hahn 定理还有画图的事情处理好.]

凸集还有一个不平凡且重要的性质：

定理 6.9 (分离超平面定理) *设 C, D 是两个非空不交凸集，也就是 $C \cap D = \varnothing$. 那么，存在 $a \neq 0$ 和 $b \in \mathbb{R}$ 使得*

- *任意 $x \in C$，$a^\mathsf{T} x \le b$.*

- 任意 $x \in D$，$a^{\mathsf{T}} x \geq b$.

由 $a^{\mathsf{T}} x = b$ 定义的超平面被称为**分离超平面**.

如果两个凸集只有一个公共点，并且其中一个凸集有内点，分离超平面定理依然成立，证明留做习题. [lhy: 习题：证明分离超平面定理]

下面我们来证明定理 6.9.

证明. 定义两个集合间的距离为：

$$d(C, D) = \inf_{x \in C, y \in D} \|x - y\|_2 .$$

我们只证明 C 和 D 都是有界闭集的情况. 此时，存在 $c \in C, d \in D$ 使得 $\|c - d\|_2 = d(C, D)$. 令 $a = d - c$，$b = (\|d\|_2^2 - \|c\|_2^2)/2$. 只需证明 $f(x) = a^{\mathsf{T}} x - b$ 在 C 上非正在 D 上非负. 对称地，只证明在 D 上非负.

注意到 $f(x) = a^{\mathsf{T}} x - b = (d - c)^{\mathsf{T}}(x - (d + c)/2)$. 假设对某个 $u \in D$，$f(u) < 0$，于是

$$f(u) = (d - c)^{\mathsf{T}}(u - d) + \frac{1}{2}\|d - c\|_2^2 < 0 \implies (d - c)^{\mathsf{T}}(u - d) < 0.$$

因此，对充分小的 $t > 0$，$\|d + t(u - d) - c\|_2 < \|d + 0 \cdot (u - d) - c\|_2 = \|d - c\|_2$. 同时，因为 D 是凸集，$d + t(u - d) \in D$. 这与 d 和 c 的假设矛盾！ □

第七章　对偶理论

在本章中，我们考虑带约束的规划问题. 它的一般形式是

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h_i(x) = 0, \qquad i = 1, \dots, m, \\ & g_j(x) \le 0, \qquad j = 1, \dots, p, \\ & x \in \Omega \subseteq \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

其中，$m \le n$，函数 f, h_i, g_j 都是连续的，且通常假设它们拥有连续的二阶导.

为简化记号，们用向量形式的函数，即 $h = (h_1, h_2, \dots, h_m)$ 和 $g = (g_1, g_2, \dots, g_p)$，把问题的形式重写为：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 0, \\ & g(x) \le 0, \\ & x \in \Omega. \end{aligned}$$

约束 $h(x) = 0, g(x) \le 0$ 被称作**函数约束**. $x \in \Omega$ 是**集合约束**. 我们并不强调集合约束，因此假设在大部分情况下 Ω 就是整个 $\mathbb{R}^n$ 的空间，或者问题的解就在 Ω 的内部.

一个满足所有函数约束的点 $x \in \Omega$ 被称作**可行解**，而使得 f 取得最小值的可行解叫做**最优解**. 有时候优化问题的目标可能是最大化 f，此时相应的最优解就是使得 f 取得最大值的可行解. 本章的任务是讨论各种情况下最优值的必要条件，这些必要条件最终形成了所谓的**对偶理论**.

§7.1 条件极值与 Lagrange 乘子法

我们现在先只考虑等式约束

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 0, \\ & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{7.1}$$

这些约束定义了一个 $\mathbb{R}^n$ 的子集，可以被看作一个曲面. 在恰当的条件下，这个曲面是 $n-m$ 维的（类比线性空间）. 如果函数 $h_i, i = 1, 2, \ldots, m$ 有一阶连续导数（记为属于 C^1），那么他们定义的曲面就是*光滑*的. 曲面上可以定义*切空间*.

为了引入切空间，我们先介绍曲线，然后曲线的定义可以导出切空间的定义.

定义 7.1 (曲线与切空间)

- 超平面 S 上的一条**曲线**是一系列点的集合：$x(t) \in S$，它们以 t 为参数，$a \le t \le b$ 且在该区间上连续.
- 称曲线是**可微的**，如果 $\dot{x} = \mathrm{d}(x(t))/\mathrm{d}t$ 存在.
- 称曲线 $x(t)$ **经过点** x^*，如果存在 $t^* \in [a, b]$ 使得 $x^* = x(t^*)$.
- 曲线在 x^* 的**导数**被定义为 $\dot{x}(t^*)$，该导数是 $\mathbb{R}^n$ 内的一个向量，这个向量可以看作沿着曲线 t 在 x^* 处的切向量.
- 考虑所有 S 内经过点 x^* 的可微曲线. 点 x^* 处的**切空间** $T_{x^*}(S)$ 被定义为这些曲线在点 x^* 处的导数的集合.

切空间的重要特点是，它是一个线性空间.

引理 7.1 *切空间是一个线性空间.*

既然切空间是一个线性空间，我们的一个主要目标就是给出切空间的显示表达，比如给出它的一组基向量. 考虑一条曲线 $x(t)$，如果它在 $h_i(x) = 0$ 形成的曲面上，那么应该有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} h_i(x(t)) = 0 \iff \nabla_x h_i(x(t)) \dot{x}(t) = 0.$$

因此 $x(t)$ 的切向量和该点处函数 $h_i(x(t))$ 的导数正交. 于是，如果 $x(t)$ 在 $h(x) = 0$ 形成的曲面上，那么 $x(t)$ 处的导数 $\nabla h(x(t))$ 是切平面的法向量. 这一数学推导的示意图见图 7.1.

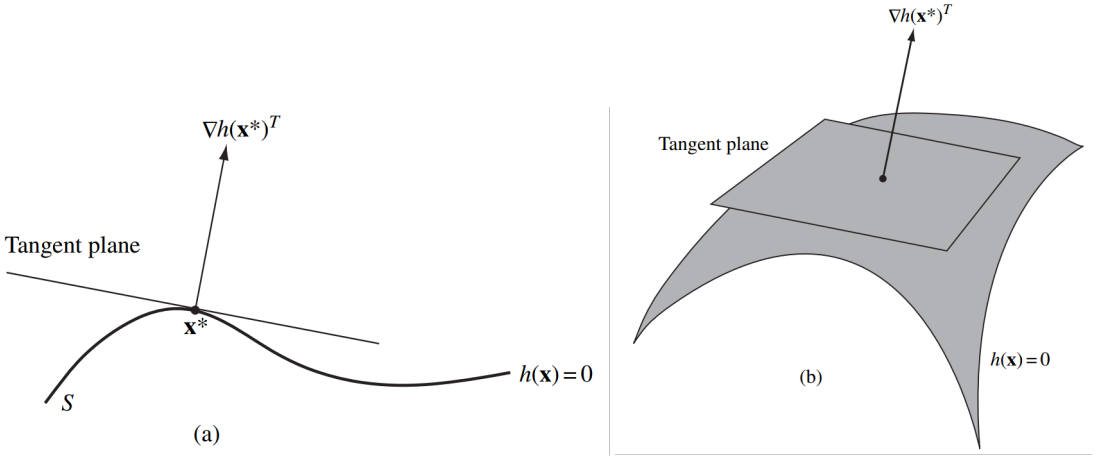


图 7.1: 切空间的示意图.

我们把刚刚得到的垂直于 $\nabla h(x^*)y$ 的子空间（即正交补空间）记作

$$M = \{y \in \mathbb{R}^n : \nabla h(x^*)y = 0\}.$$

我们已经证明 $T_{x^*}(S) \subseteq M$. 反过来，在什么条件下会有 $M = T_{x^*}(S)$? 为此，我们引入正规点的概念.

定义 7.2 (正规点) 考虑优化问题 (7.1)，当一个点 $x^* \in \Omega$ 满足约束 $h(x^*) = 0$，且梯度向量 $\nabla h_1(x^*), \nabla h_2(x^*), \ldots, \nabla h_m(x^*)$ 线性无关时，它被称作该约束的**正规点**.

直观上来说，正规点上每一条约束都起到了实际的作用，因此梯度向量 $\nabla h_i(x^*)$ 形成了一个线性无关的集合，张成了空间 $M^\perp$. 此时，切空间恰好完全垂直于 $M^\perp$，即 $T_{x^*}(S) = M$. 这一几何直观见图 7.2，点 x^* 处的两个等式约束共同确定了该点的切空间. 因此，在正规点，用约束函数的梯度来描述切空间是可行的.

定理 7.1 (正规点切空间刻画定理) *设曲面 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 由约束 $h(x) = 0$ 定义，$x^* \in S$ 是正规点，那么，*

$$T_{x^*}(S) = M = \{y : \nabla h(x^*)y = 0\}.$$

该定理的证明需要隐函数定理，对微积分要求较高，我们这里略去.

有了切空间的准备，现在我们要对正规点推导带约束的优化问题的极值条件. 考虑优化(7.1)，设 x^* 是一个约束 $h(x) = 0$ 一个正规点，同时也是函数 f 的一个在可行域中的极值点.

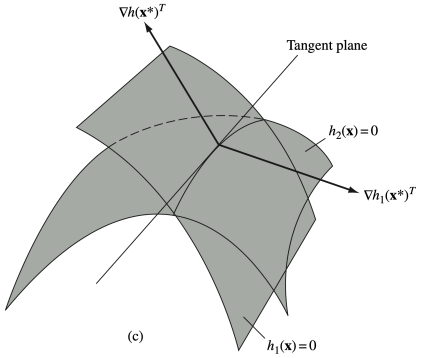


图 7.2: 正规点示意图.

引理 7.2 *对 $y \in \mathbb{R}^n$，如果 $\nabla h(x^*)y = 0$，那么 $\nabla f(x^*)y = 0$.*

证明. 因为 x^* 是正规点，根据正规点切空间刻画定理，$\nabla h(x^*)y = 0$ 等价于 y 是 x^* 处的切空间中的向量. 根据定义，存在该约束曲面内的某个光滑曲线 $x(t)$，经过点 x^*，并且以 y 为切向量. 那么，$x(0) = x^*$，$\dot{x}(0) = y$，且 $h(x(t)) = 0$ 在区间 $-a \le t \le a$ 上成立（对某个正数 a）. 因为点 x^* 是一个函数 f 的受等式约束的极值点，我们有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} f(x(t))\bigg|_{t=0} = 0 \iff \nabla f(x^*)y = 0. \qquad \square$$

引理 7.2 对任意 $y \in \mathbb{R}^n$ 都成立，根据线性代数零空间的性质，这等价于 $\nabla f(x^*)$ 是 $\nabla h_i(x^*)$ 的线性组合，即

$$\nabla f(x^*) = \sum_i \lambda_i \nabla h_i(x^*).$$

据此，我们得到条件极值的一阶必要条件：

定理 7.2 (条件极值的一阶必要条件) *令 x^* 是一个 f 的满足约束 $h(x) = 0$ 的正规极值点. 那么存在一个 $\lambda \in \mathbb{R}^m$ 使得*

$$\nabla f(x^*) + \lambda^{\mathsf{T}} \nabla h(x^*) = 0.$$

一阶必要条件 $\nabla f(x^*) + \lambda^{\mathsf{T}} \nabla h(x^*) = 0$ 以及约束 $h(x^*) = 0$ 给出了 $n + m$ 个等式，包含 x^*, λ 在内的 $n + m$ 个变量. 因此在非退化的情况下，他们给出了一个唯一解.

引入与这个约束问题对应的 Lagrange 函数：

$$l(x, \lambda) = f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} h(x).$$

λ 被称为 *Lagrange* 乘子. 必要条件可以被写作：

$$\nabla_x l(x,\lambda) = 0,$$
$$\nabla_\lambda l(x,\lambda) = 0.$$

例 7.1 (最大熵) 考虑一个离散的概率分布，其分布列为 $p_i = \Pr(X = x_i), i = 1,\dots,n$. 该分布的熵为

$$\epsilon = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i.$$

该分布的均值为 $\sum_{i=1}^{n} x_i p_i$.

如果均值固定为 m，求解使熵最大化的参数可以被转化成以下问题：

$$\begin{aligned} \max \quad & -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i \\ \text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{n} p_i = 1, \\ & \sum_{i=1}^{n} x_i p_i = m, \\ & p_i \geq 0, \qquad i = 1,2,\dots,n. \end{aligned}$$

我们先忽略非负约束，假设这些约束不会被触发. 引入两个 Lagrange 乘子，λ 和 μ，则 Lagrange 函数为

$$l = \sum_{i=1}^{n} (-p_i \log p_i + \lambda p_i + \mu x_i p_i) - \lambda - \mu m.$$

由一阶必要条件，$-\log p_i - 1 + \lambda + \mu x_i = 0$，$i = 1,2,\dots,n$. 因此，

$$p_i = \exp((\lambda - 1) + \mu x_i), \quad i = 1,2,\dots,n.$$

注意 $p_i > 0$，所以非负约束确实没有被触发. Lagrange 乘子 λ 和 μ 是两个用来保证等式约束被满足的参数. □

§7.2 Karush–Kuhn–Tucker 条件

现在加入不等式约束，考虑以下形式的问题：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 0, \\ & g(x) \leq 0. \end{aligned} \tag{7.2}$$

假设 f 和 h 和前面一样，g 是一个 p 维的函数，$f,h,g \in C^1$.

我们推广正规点 x^* 的定义为：

定义 7.3 (正规点) 考虑优化问题 (7.2)，点 x^* 被称为**正规点**，如果

- 它满足约束：$h(x^*) = 0, g(x^*) \leq 0$.
- 令 J 为满足 $g_j(x^*) = 0$ 的下标 j 的集合（激活的约束）. 那么，梯度向量 $\nabla h_i(x^*)$，$\nabla g_j(x^*)$，$1 \leq i \leq m$，$j \in J$ 是线性无关的.

换言之，此时的正规点不仅考虑等式约束，还要考虑起作用的或者说被激活的不等式约束，这些不等式约束相当于等式约束. 类似 Lagrange 乘子法，此时的一阶必要条件为：

定理 7.3 (Karush-Kuhn-Tucker 条件) *令 x^* 为优化问题 (7.2) 的正规极小值点，那么，存在向量 $\lambda \in \mathbb{R}^m$ 和向量 $\mu \in \mathbb{R}^p$ 且 $\mu \geq 0$ 使得*

$$\nabla f(x^*) + \lambda^{\mathsf{T}} \nabla h(x^*) + \mu^{\mathsf{T}} \nabla g(x^*) = 0, \tag{7.3}$$

$$\mu^{\mathsf{T}} g(x^*) = 0. \tag{7.4}$$

证明. 首先，因为 $\mu \geq 0$ 且 $g(x^*) \leq 0$，(7.4) 等价于：μ 的一个分量非零仅当对应的约束被激活（即取到等号）. 这是一个互补松弛条件，即 $g(x^*)_i < 0$ 可得出 $\mu_i = 0$，以及 $\mu_i > 0$ 可得出 $g(x^*)_i = 0$.

设被激活的下标为 J. 因为 x^* 是约束集合上的一个极小点，它也是满足等式约束 $h(x) = 0, g_i(x) = 0, i \in J$ 的极小点. 因此，在新的等式约束问题中，x^* 的邻域中存在 Lagrange 乘子，满足一阶必要条件. 我们得出结论：一阶必要条件 (7.3) 成立，且若 $g_j(x^*) \neq 0$，则 $\mu_j = 0$.（于是也有 (7.4) 成立）

现在还需要证明 $\mu \geq 0$. 用反证法，假设 $\mu_k < 0$ 对某个 $k \in J$ 成立. 设 S 为其他所有被激活的约束在 x^* 处定义的曲面，$M = T_{x^*}(S)$. 因为 x^* 是正规的，存在 $y \in M$ 且 $\nabla g_k(x^*) y < 0$. 令 $x(t)$ 为一条在 S 内且经过 x^*（此处 $t = 0$）的曲线，且有 $\dot{x}(0) = y$. 则对于充分小的 $t \geq 0$，$x(t)$ 是可行的，由 (7.3) 以及 $y \in M$，

$$\begin{aligned} \left.\frac{\mathrm{d} f(x(t))}{\mathrm{d} t}\right|_{t=0} &= \nabla f(x^*) y \\ &= -\lambda^{\mathsf{T}} \nabla h(x^*) y - \mu^{\mathsf{T}} \nabla g(x^*) y \\ &= -\mu_k \nabla g_k(x^*) y < 0. \end{aligned}$$

这与 x^* 是极小点矛盾. □

注. 这一证明具有很强的几何直观，关键在于找一个可行的方向使得函数值下降. 非常需要注意的是，这一证明并不能用于否证 $\mu_k > 0$. 此时需要取 $y \in M$ 使得 $\nabla g_k(x^*)y > 0$. 然而此时对应的 $x(t)$ 不再可行，因为对充分小的 $t > 0$，$g_k(x(t)) > 0$，违背了约束的条件.

下面我们来看一个运用 KKT 条件的例子：

例 7.2 考虑问题

$$\begin{aligned} \min \quad & 2x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2 - 10x_1 - 10x_2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1^2 + x_2^2 \leq 5, \\ & 3x_1 + x_2 \leq 6. \end{aligned}$$

KKT 条件为（注意，一阶必要条件还需要加入问题中的约束条件）

$$\begin{aligned} 4x_1 + 2x_2 - 10 + 2\mu_1 x_1 + 3\mu_2 &= 0, \\ 2x_1 + 2x_2 - 10 + 2\mu_1 x_2 + \mu_2 &= 0, \\ \mu_1(x_1^2 + x_2^2 - 5) &= 0, \\ \mu_2(3x_1 + x_2 - 6) &= 0, \\ \mu_i \geq 0, \quad i &= 1, 2. \end{aligned}$$

为了求解此类问题，我们假设一些约束被激活，然后检查所得出的 Lagrange 乘子的符号正负. 在这个问题中，我们可以尝试假设有 0，1，2 个约束被激活.

假设第一个约束被激活，第二个约束没有被激活，得出等式

$$\begin{aligned} 4x_1 + 2x_2 - 10 + 2\mu_1 x_1 &= 0, \\ 2x_1 + 2x_2 - 10 + 2\mu_1 x_2 &= 0, \\ x_1^2 + x_2^2 &= 5. \end{aligned}$$

可得解 $x_1 = 1, x_2 = 2, \mu_1 = 1$.

由于 $3x_1 + x_2 = 5$，因此第二个约束也被满足了. 因此，因为 $\mu_1 > 0$，我们得出结论，这个解满足一阶必要条件. □

§7.3 Lagrange 对偶

§7.3.1 Lagrange 定理

现在，我们不再假设函数可微，我们考虑极值点的零阶必要条件，首先考虑只有等式约束的情形：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 0, \\ & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{7.5}$$

如果函数 f 是凸函数，m 维函数 h 是仿射的，并且集合 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 是是凸的，那么这个规划问题是一个*凸规划问题*.

为了给这样的问题一个一阶必要条件，我们依然需要引入正规性条件. 此时正规性不再仅仅只对一个点，而是对仿射函数 h.

定义 7.4 (正规性条件) 一个仿射函数 h 关于集合 Ω 是**正规的**，指的是像集 $h(\Omega) = \{y : \exists x \in \Omega\, h(x) = y\}$ 包含 0 处的一个开球邻域. 也就是说，$h(\Omega)$ 包含一个形如 $\{y : \|y\| < \epsilon\}$（对某个 $\epsilon > 0$）的集合.

> **注.** 这个条件是一阶正规点定义的推广. 如果 h 在点 x^* 有连续的导数，那么一阶正规性条件意味着 $\nabla h(x^*)$ 是满秩的，并且由隐函数定理可知存在一个 $\epsilon > 0$ 使得对于任意满足 $\|y - h(x^*)\| < \epsilon$ 的 y，都有一个 x 使得 $h(x) = y$. 换言之，存在一个 $y^* = h(x^*)$ 周围的开球.

我们可以用 Lagrange 乘子来表述零阶必要条件：

定理 7.4 (零阶必要条件，等式约束情形) *假设 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 是凸的，f 是 Ω 上的凸函数，h 是一个 Ω 上的 m 维仿射函数. 假设 h 是对于 Ω 正规的. 如果 x^* 是 (7.5) 的解，那么存在 $\lambda \in \mathbb{R}^m$ 使得 x^* 是以下 Lagrange 问题的解：*

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} h(x) \\ s.t. \quad & x \in \Omega. \end{aligned}$$

这一定理证明的关键在于引入*原始函数*. 对应于问题(7.5) 的**原始函数**是：

$$\omega(y) = \inf\{f(x) : h(x) = y, x \in \Omega\}, \quad y \in h(\Omega).$$

证明. (零阶必要条件的证明) 令 $f^* = f(x^*)$. 定义 $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}$ 内的集合 A 和 B 为:

$$A = \{(y,r) : r \geq \omega(y), y \in h(\Omega)\},$$
$$B = \{(y,r) : r \leq f^*, y = 0\}.$$

A 是 ω 的上图，B 是 f^* 向下延申并与原点对齐的垂线. A 和 B 都是凸集. 他们唯一的公共点是 $(0, f^*)$. 由超平面分离定理可知，存在一个超平面分离 A 和 B. 这个超平面可以被表示成一个在 $\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}$ 内的形如 $(\lambda, s), \lambda \in \mathbb{R}^m$ 的非零向量，还有一个分离常数 c. 分离条件是

$$sr + \lambda^\mathsf{T} y \geq c, \quad \forall (y,r) \in A, \quad sr + \lambda^\mathsf{T} y \leq c, \quad \forall (y,r) \in B.$$

这一过程的示意图见图 7.3.

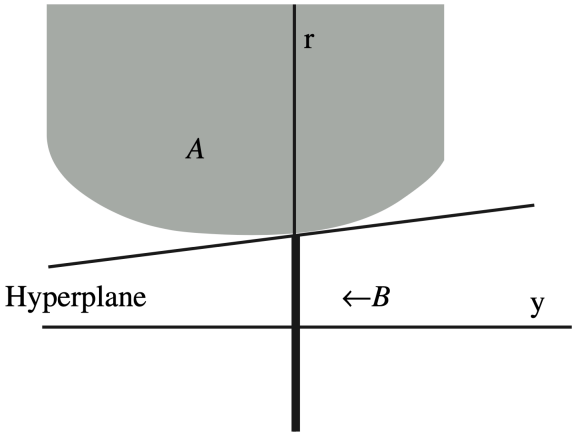


图 7.3: 证明示意图.

注意到 $s \geq 0$，否则取 $|r|$ 非常大的负数 r，点 $(r,0) \in B$ 违反第二个分离不等式. 几何上看，若 $s = 0$，超平面将垂直. 我们来证明 $s \neq 0$. 假设 $s = 0$，因为 s 和 λ 不能都是 0，$\lambda \neq 0$. 因为分离超平面必须包含点 $(f^*, 0)$，从第二个分离不等式得 $c = 0$. 由 h 的正规性，以 $0 \in h(\Omega)$ 为中心的某个球包含在 $h(\Omega)$ 中，任取 y 属于这个开球. 第一个分离不等式左侧为 $\lambda^\mathsf{T} y$，它对于某些 y 来说是负的. 这违背第一个分离不等式. 因此 $s \neq 0$，继而 $s > 0$.

不失一般性，可以假设 $s = 1$. 假设 $x \in \Omega$. 那么 $(h(x), f(x)) \in A$ 且 $(0, f(x^*)) \in B$. 因此，由分离不等式可知，我们有

$$f(x) + \lambda^\mathsf{T} h(x) \geq f(x^*) = f(x^*) + \lambda^\mathsf{T} h(x^*).$$

因此 x^* 是优化问题 (7.5) 解. □

我们再考虑只有不等式约束的模型

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g(x) \leq 0, \\ & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{7.6}$$

其中，g 是一个 p 维的函数.

然后我们引入正规性条件. 对于不等式约束来说，正规性条件也被称为做 *Slater* 条件.

定义 7.5 (Slater 条件) 考虑优化问题 (7.6)，令

$$D = \{z \in \mathbb{R}^p : \exists x \in \Omega\, g(x) \leq z\}.$$

正规性条件（Slater 条件）为：存在一个 $z' \in D$ 使得 $z' < 0$.

直观来说，Slater 条件指的是存在满足约束的内点.

类似地，我们可以用 Lagrange 乘子来表述零阶必要条件：

定理 7.5 (零阶必要条件，不等式情形) *假设 Ω 是一个 $\mathbb{R}^n$ 的凸子集，且 f 和 g 是凸函数. 假设优化问题 (7.6) 满足正规性条件，x^* 是该问题的解，那么存在一个向量 $\mu \in \mathbb{R}^p$ 满足 $\mu \geq 0$ 使得 x^* 是下述 Lagrange 问题的解：*

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x^*) + \mu^{\mathsf{T}} g(x) \\ s.t. \quad & x \in \Omega. \end{aligned}$$

此外，$\mu^{\mathsf{T}} g(x^*) = 0$.

这一定理的证明类似于定理 7.4 的证明. 首先还是引入原始函数. 问题 (7.6) 对应的原始函数为：

$$\omega(z) = \inf\{f(x) : g(x) \leq z, x \in \Omega\}, z \in D.$$

证明. (证明概要) 令 $f^* = f(x^*)$. 在 $\mathbb{R}^p \times \mathbb{R}$ 内定义两个集合

$$\begin{aligned} A &= \{(z, r) : r \geq \omega(z), z \in D\}, \\ B &= \{(z, r) : r \leq f^*, z \leq 0\}. \end{aligned}$$

A 和 B 都是凸的. 证明依然是构造 A, B 的分离超平面，正规性条件保证了超平面不会是垂直的. 这个过程的示意见图图 7.4.

条件 $\mu^{\mathsf{T}} g(x^*) = 0$ 是互补松弛条件，这一讨论类似 KKT 条件. □

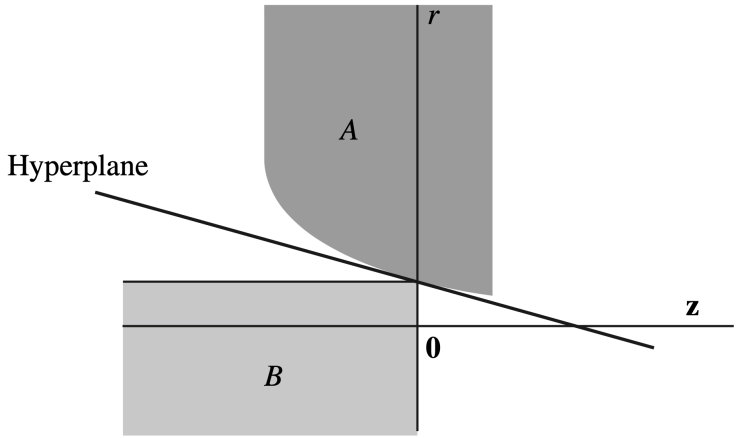


图 7.4: 证明示意图.

现在，我们考虑一般情形，

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 0, \\ & g(x) \leq 0, \\ & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{7.7}$$

组合以上两个零阶必要条件，我们得到一般情形的 Lagrange 定理.

定理 7.6 (Lagrange，零阶必要条件，混合情形) *假设 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 是凸集. f 和 g 是一维和 p 维的凸函数，h 是维数为 m 的仿射函数. 假设 h 满足对于 Ω 的正规性条件，且 g 在 (7.7) 的可行域上满足正规性条件. 假设 x^* 是问题 (7.7) 的解. 那么存在向量 $\lambda \in \mathbb{R}^m$ 和 $\mu \in \mathbb{R}^p$ 满足 $\mu \geq 0$ 使得 x^* 是以下 Lagrange 问题的解：*

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} h(x) + \mu^{\mathsf{T}} g(x) \\ s.t. \quad & x \in \Omega. \end{aligned}$$

此外，$\mu^{\mathsf{T}} g(x^*) = 0$.

[lhy: 举个例子]

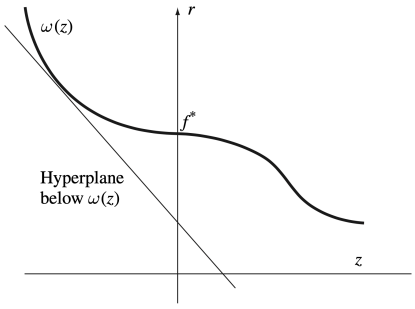


图 7.5: 纵截距的示意图.

§7.3.2 弱对偶定理，强对偶定理

Lagrange 定理有非常强的几何直观，这一直观最终导致了优化中的对偶理论. 先考虑不等式约束的情形：

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & g(x) \leq 0, \\ & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{7.8}$$

$\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 是凸集，函数 f 和 g 定义在 Ω 上. 函数 g 是 p 维的.

回忆原始函数的定义：

$$\omega(z) = \inf\{f(x) : g(x) \leq z, x \in \Omega\}.$$

设 x^* 是 (7.8) 的解，$f^* = f(x^*)$，那么函数 $\omega(z)$ 与纵轴的交点是 f^*. 如果 (7.8) 没有解，那么 $f^* = \inf\{f(x) : g(x) \leq 0, x \in \Omega\}$ 就是纵轴与 $\omega(z)$ 的交点. 考虑在 $\omega(z)$ 以下的超平面，关注其纵截距（见图图 7.5），我们用它产生对偶原理.

为了刻画超平面以及其纵截距，我们引入对偶函数. 在 $\mathbb{R}^p_{\geq 0}$ 上定义**对偶函数**为：

$$\varphi(\mu) = \inf\{f(x) + \mu^{\mathsf{T}} g(x) : x \in \Omega\}.$$

定义其最大值为

$$\varphi^* = \sup\{\varphi(\mu), \mu \geq 0\}.$$

我们很容易可以证明以下定理：

定理 7.7 (弱对偶定理) $\varphi^* \leq f^*$.

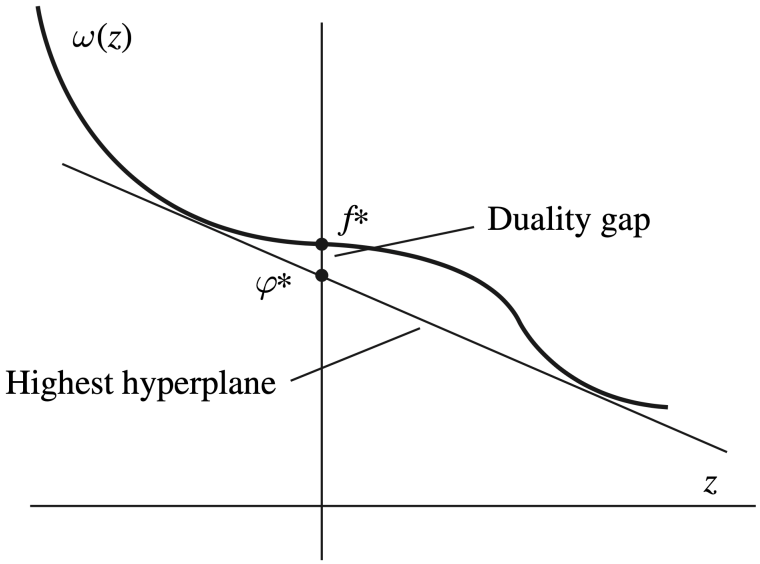


图 7.6: 对偶间距的示意图.

证明. 对任意 $\mu \geq 0$ 我们有

$$\begin{aligned}\varphi(\mu) &= \inf\{f(x) + \mu^{\mathsf{T}} g(x) : x \in \Omega\} \\ &\leq \inf\{f(x) + \mu^{\mathsf{T}} g(x) : g(x) \leq 0, x \in \Omega\} \\ &\leq \inf\{f(x) : g(x) \leq 0, x \in \Omega\} = f^*.\end{aligned}$$

由此，$\varphi^* \leq f^*$. □

弱对偶定理也有非常几何的解释. 考虑向量 $(\mu, 1) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}$，$\mu \geq 0$ 和一个常数 c. 关于 (z, r) 的方程 $(\mu, 1)^{\mathsf{T}}(z, r) = r + \mu^{\mathsf{T}} z = c$ 定义了一个 $\mathbb{R}^p \times \mathbb{R}$ 内的超平面. 不同的 c 得到不同的超平面，他们都是平行的. 对于给定的 $(\mu, 1)$（即平行的超平面），选取一个最低的超平面，使得它刚刚碰到了原始函数上图边界. 假设 x_1 是这个触点，有 $r = f(x_1)$ 和 $z = g(x_1)$. 那么 $c = f(x_1) + \mu^{\mathsf{T}} g(x_1) = \varphi(\mu)$. 注意到此时 $c = \varphi(\mu)$ 就是截距，这就是 $\varphi(\mu)$ 的几何含义.

另一方面，求截距 c（对偶函数值）的最大值 φ^*，就是求位于原始函数之下的超平面的最大截距. 因此至少有 $\varphi^* \leq f^*$，差 $f^* - \varphi^*$ 被称为对偶间距. 这就是弱对偶定理，图示参见图 7.6.

由此可以得到对偶性原理：位于 ω 之下的超平面的最大截距等于刚刚碰到 ω 的超平面的最小截距.

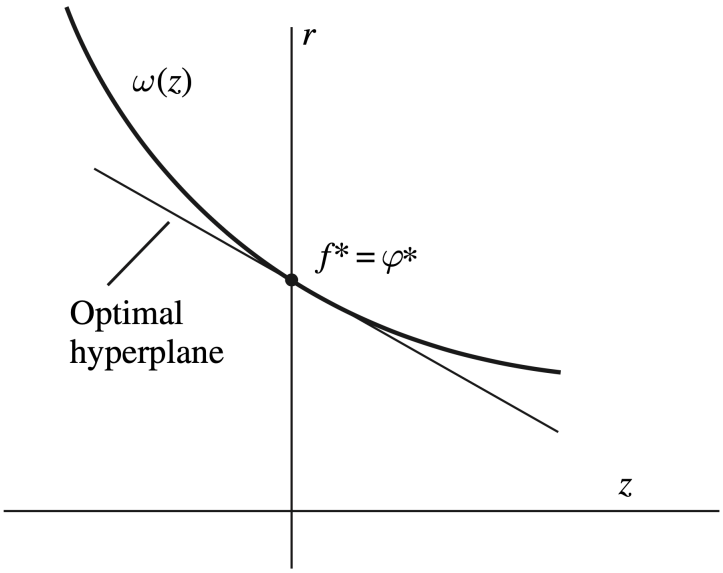


图 7.7: 强对偶定理的示意图.

如果原始函数 ω 是凸的，那么弱对偶定理可以被加强到强对偶定理，此时 φ^* 和 f^* 之间不再存在对偶间距，图 7.6 变成了图 7.7.

下面我们叙述并证明强对偶定理. 我们直接考虑一般的优化问题.

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s.t.} \quad & h(x) = 0, \\ & g(x) \leq 0, \\ & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{7.9}$$

其中，h 是 m 维仿射函数，g 是 p 维凸函数，$\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ 是凸集.

原始函数可以写作

$$\omega(y,z) = \inf\{f(x) : \exists x \in \Omega\, h(x) = y, g(x) \leq z\}.$$

对偶函数定义为:

$$\varphi(\lambda,\mu) = \inf\{f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} h(x) + \mu^{\mathsf{T}} g(x) : x \in \Omega\}.$$

它的最大值记为

$$\varphi^* = \sup\{\varphi(\lambda,\mu) : \lambda \in \mathbb{R}^m, \mu \in \mathbb{R}^p, \mu \geq 0\}.$$

利用以上定义，我们可以表述强对偶定理如下:

	原料 1	原料 2	原料 3	售价（万元/吨）
清洁剂 A	0.25	0.50	0.25	12
清洁剂 B	0.50	0.50		15
存量（吨）	120	150	50	

表 7.1: 清洁剂原料价格存量表.

定理 7.8 (强对偶定理) *在问题 (7.9) 中，假设 h 是对于 Ω 正规的，在可行域内 g 满足正规性条件. 假设 x^* 是问题 (7.9) 的解，设 $f(x^*) = f^*$. 那么对每个 λ 和 $\mu \geq 0$ 都有*

$$\varphi(\lambda, \mu) \leq f^*.$$

另外，存在 $\lambda, \mu \geq 0$ 使得

$$\varphi(\lambda, \mu) = f^*.$$

因此 $\varphi^* = f^*$. 与此同时，λ, μ 是该问题的 Lagrange 乘子.

证明. 由 Lagrange 零阶条件定理（定理 7.6）可知：

$$\begin{aligned} f^* &= \min\{f(x) + \lambda^{\mathsf{T}} h(x) + \mu^{\mathsf{T}} g(x) : x \in \Omega\} \\ &= \varphi(\lambda, \mu) \leq \varphi^* \leq f^*. \end{aligned}$$

因此，$\varphi^* = f^*$，并且取等号的 λ, μ 是 Lagrange 乘子. □

从对偶原理我们可以写出对偶规划的一般形式：

$$\begin{array}{cc|cc} \multicolumn{2}{c|}{\text{原始问题}} & \multicolumn{2}{c}{\text{对偶问题}} \\ \min & \omega(y,z) & \max & \varphi(\lambda,\mu) \\ \text{s.t.} & y = 0, & \text{s.t.} & \lambda \in \mathbb{R}^m, \\ & z \leq 0. & & \mu \geq 0. \end{array}$$

作为例子，下面我们给一个对偶规划的经济学解释.

例 7.3 (线性规划的经济学解释) 表 7.1 描述了公司甲用原料生产清洁剂的价格与存量表.

甲用 3 种原料混合成 2 种清洁剂. 2 种清洁剂应该如何配制，使总价值最大?

设清洁剂 A 和 B 分别配制 x_1 和 x_2，我们可以把甲的目标写成一个规划问题：

$$\begin{aligned}
\max \quad & z = 12x_1 + 15x_2 \\
\text{s.t.} \quad & 0.25x_1 + 0.50x_2 \leq 120, \\
& 0.50x_1 + 0.50x_2 \leq 150, \\
& 0.25x_1 \leq 50, \\
& x_1 \geq 0, \\
& x_2 \geq 0.
\end{aligned}$$

现在有一个公司乙需要这 3 种原料，打算向甲购买，应付出多少钱？

乙向甲购买 3 种原料，出价分别为每吨 y_1, y_2, y_3 万元. 希望总价格尽量小，但不能低于甲用原料生产清洁剂所产生的价值，因此写出规划问题为：

$$\begin{aligned}
\min \quad & w = 120y_1 + 150y_2 + 50y_3 \\
\text{s.t.} \quad & 0.25y_1 + 0.50y_2 + 0.25y_3 \geq 12, \\
& 0.50y_1 + 0.50y_2 \geq 15, \\
& y_1 \geq 0, \\
& y_2 \geq 0, \\
& y_3 \geq 0.
\end{aligned}$$

注意到，以上两个规划问题恰好互为对偶问题. □

§7.4 应用：支持向量机（SVM）

作为前面极值必要条件的一个具体应用，我们考虑一个经典的机器学习分类器：*支持向量机*（SVM）.

考虑二分类问题，输入 $x \in \mathbb{R}^n$，函数 f 输出一个 $\{-1, 1\}$ 中的值. 二分类问题的学习问题指的是给定训练集 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$，找到 f 使得 $f(x_i) = y_i$. 假设训练集是线性可分的，例如，存在某个 $w \in \mathbb{R}^n$ 和 $b \in \mathbb{R}$ 使得

$$f(x) = \begin{cases} 1, & w^\mathsf{T} x + b > 0, \\ -1, & w^\mathsf{T} x + b < 0. \end{cases}$$

学习问题的首要目标是找到正确的以及最优的 w 和 b. 本质上说，这就是一个*找分离超平面*的过程. 那么，什么才叫最优呢？从几何视角来看，一个自然的想法是最大化*分离距离*，即训练集中所有点到分离超平面的距离和的最小值，见图 7.8.

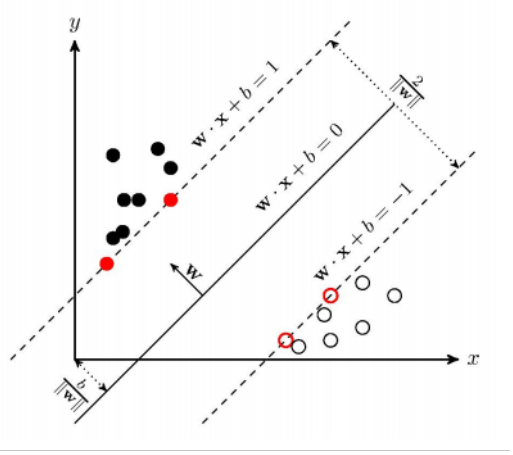


图 7.8: 分离距离示意图.

采样点 x_i 到分离超平面的归一化距离为

$$\gamma_i = y_i \left(\left(\frac{w}{\|w\|_2} \right)^{\mathsf{T}} x + \frac{b}{\|w\|_2} \right).$$

$\gamma = \min_i \gamma_i$ 是最小的归一化距离. 于是我们的任务变成了最大化 γ. 等价地，我们求解如下优化问题

$$\begin{aligned} \max_{w,b} \quad & \gamma \\ \text{s.t.} \quad & \gamma \leq \gamma_i, \quad i = 1, 2, \ldots, N. \end{aligned}$$

$\gamma \leq \gamma_i$ 等价于

$$y_i \left(\left(\frac{w}{\gamma \|w\|_2} \right)^{\mathsf{T}} x + \frac{b}{\gamma \|w\|_2} \right) \geq 1.$$

简洁起见，把 w 替换成 $\frac{w}{\gamma\|w\|_2}$，把 b 替换成 $\frac{b}{\gamma\|w\|_2}$，我们有

$$y_i(w^{\mathsf{T}} x + b) \geq 1.$$

那么最大化 $\gamma = \frac{1}{\|w\|_2}$ 等价于最小化 $\|w\|_2^2$.

我们得到以下凸规划问题:

$$\begin{aligned} \min_{w,b} \quad & \frac{1}{2}\|w\|_2^2 \\ \text{s.t.} \quad & y_i(w^{\mathsf{T}} x_i + b) \geq 1, \quad i = 1, 2, \cdots, N. \end{aligned}$$

如何解决这个问题? 利用上面的对偶理论，我们有如下步骤:

- 第一步，用 Lagrange 乘子法，转化成 Lagrange 问题（min-max）.
- 第二步，写出对偶问题（max-min），验证强对偶定理的正规性条件，于是只需要求解对偶规划.
- 第三步，写出 KKT 条件，将对偶规划解为一个二次规划（min），用优化算法求解二次规划.

第八章　不动点理论

考虑优化算法 A，它在函数 f 上的的收敛性如何？算法运行所产生的点列记为 $\{x_n\}$，它满足 $x_{n+1} = A(x_n)$. 如果关注序列 x_n 本身，那么这是一个数学分析的思路，通过寻找不同量之间的联系，来分析收敛性. 如果从算法 A 本身来看，这是一个算子法与泛函分析的思路，研究算法本身的性质，收敛性往往归结为吸收点的存在性. 后者是更加抽象且现代的思路. 在本章中，我们将看到，从算子的角度来理解收敛性，最终问题就归结到了*不动点理论*.

不动点的定义是非常直接的，考虑一个集合 X 以及它到自身的映射 $f : X \to X$，元素 $a \in X$ 称为映射 $f : X \to X$ 的**不动点**，如果 $f(a) = a$. 本章将介绍三种不动点存在性定理.

§8.1　Banach 不动点定理

为了陈述不动点定理，我们需要引入一些数学概念.

定义 8.1 (度量与度量空间) 集合 X 上的**度量**（或**距离**）d 是映射

$$d : X \times X \to \mathbb{R}$$

满足条件

- 非负性：$d(x_1, x_2) \geq 0$，并且 $d(x_1, x_2) = 0 \iff x_1 = x_2$.
- 对称性：$d(x_1, x_2) = d(x_2, x_1)$.
- 三角不等式：$d(x_1, x_3) \leq d(x_1, x_2) + d(x_2, x_3)$.

其中 x_1, x_2, x_3 是 X 的任意元素.

此时，(X, d) 或 X 被称为**度量空间**.

下面给出一些度量的例子.

例 8.1 考虑实数集 $\mathbb{R}$，要成为度量空间，可以装备以下度量：

- 平凡的离散度量：$\forall x_1 \neq x_2\, d(x_1, x_2) \equiv 1, d(x, x) = 0$.
- $d(x_1, x_2) = |x_1 - x_2|$.

考虑向量空间 $\mathbb{R}^n$，要成为度量空间，可以装备以下度量：

- Minkowski 度量（L^p 度量）：$d(x_1, x_2) = (\sum_{i=1}^n |x_1^i - x_2^i|^p)^{1/p}$ $(p \geq 1)$.
- Manhattan 度量（L^1 度量）：$d(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^n |x_1^i - x_2^i|$.
- Euclid 度量（L^2 度量）：$d(x_1, x_2) = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_1^i - x_2^i|^2}$.
- Chebyshev 度量（L^∞ 度量）：$d(x_1, x_2) = \max_i |x_1^i - x_2^i| = \lim_{p\to\infty}(\sum_{i=1}^n |x_1^i - x_2^i|^p)^{1/p}$. □

我们的目标是找到一类和实数集非常像的度量空间. 实数集一个非常重要的性质是实数列收敛当且仅当它是 Cauchy 列. 我们把这一性质抽象出来，就得到了如下定义：

例 8.2 度量空间 (X, d) 的点列 $\{x_n : n \in \mathbb{N}\}$ 称为 **Cauchy 列**，如果对于任何 $\epsilon > 0$，都可以找到序号 $N \in \mathbb{N}$，使得对于任何大于 N 的序号 $m, n \in \mathbb{N}$，$d(x_m, x_n) < \epsilon$ 成立.

度量空间 (X, d) 称为**完备的**，如果任意 Cauchy 列 $\{x_n : n \in \mathbb{N}\}$ 都收敛：$\exists a \in X, \lim_{n\to\infty} d(a, x_n) = 0$. □

度量空间的任何收敛点列显然是 Cauchy 列，完备性本质上只是假设 Cauchy 收敛准则在该空间成立.

下面是一些完备度量空间的例子

例 8.3

- L^p 度量下下 $\mathbb{R}^n$ 是完备的.
- 使用度量 $d(x_1, x_2) = |x_1 - x_2|$，则 $X = \mathbb{R} \setminus \{0\}$ 不是完备度量空间. 考虑 $\{x_n = \frac{1}{n} : n \in \mathbb{N}\}$，它是 Cauchy 列，但该点列在 X 中没有极限（极限是 0）.
- $[0, 1]$ 到自身的连续函数空间 $C([0, 1])$ 在 L^∞ 度量下是完备的. 此时

$$d(f, g) = \sup_{x\in[0,1]} |f(x) - g(x)|,$$

完备性由一致收敛得到，函数空间是泛函分析中一个典型的研究对象. □

下面我们给出与 Banach 不动点定理相关的概念：

定义 8.2 (压缩映射) 度量空间 (X,d) 到自身的映射 $f: X \to X$ 称为**压缩映射**，如果存在 $0 < q < 1$，使得不等式

$$d(f(x_1), f(x_2)) \leq q \cdot d(x_1, x_2)$$

对于 X 中的任何两个点 x_1, x_2 都成立.

用 $\delta - \epsilon$ 语言容易证明压缩映射一定是连续映射：

引理 8.1 *压缩映射 $f: X \to X$ 是连续映射.*

压缩映射一定有不动点，这就是 Banach 不动点定理：

定理 8.1 (Banach 不动点定理，压缩映像原理) *完备度量空间 (X,d) 到自身的压缩映射 $f: X \to X$ 具有唯一的不动点 a.*

此外，对于任何点 $x_0 \in X$，迭代序列 $x_0, x_1 = f(x_0), \cdots, x_{n+1} = f(x_n), \cdots$ 收敛到 a. 收敛速度由以下估计给出：

$$d(a, x_n) \leq \frac{q^n}{1-q} d(x_1, x_0).$$

证明. 首先证明存在性. $d(x_{n+1}, x_n) \leq q d(x_n, x_{n-1}) \leq \cdots \leq q^n d(x_1, x_0)$. 从而

$$\begin{aligned} d(x_{n+k}, x_n) &\leq d(x_n, x_{n+1}) + \cdots + d(x_{n+k-1}, x_{n+k}) \\ &\leq (q^n + \cdots + q^{n+k-1}) d(x_1, x_0) \leq \frac{q^n}{1-q} d(x_1, x_0). \end{aligned}$$

因此 $\{x_n\}$ 是 Cauchy 列，存在极限 $\lim_{n\to\infty} x_n = a \in X$. 结合压缩映射的连续性，有 $a = \lim_{n\to\infty} x_{n+1} = \lim_{n\to\infty} f(x_n) = f(\lim_{n\to\infty} x_n) = f(a)$.

然后证明唯一性. 若 f 还有其他不动点 a_1, a_2，则 $0 \leq d(a_1, a_2) = d(f(a_1), f(a_2)) \leq q d(a_1, a_2)$. 而这当且仅当 $d(a_1, a_2) = 0$，即 $a_1 = a_2$ 时才可能成立. 最后证明收敛速度. 对 $d(x_{n+k}, x_n) \leq \frac{q^n}{1-q} d(x_1, x_0)$. 取 $k \to \infty$，得到 $d(a, x_n) \leq \frac{q^n}{1-q} d(x_1, x_0)$. □

例 8.4 (落在地面上的地图) 将一座公园的地图铺开在公园地面上，则地面上恰有唯一一点与地图上对应的点重合. 设公园可以用有界的面闭区域 Ω 表示. 设地图的压缩比是 $\lambda \in (0,1)$. 现在固定一个平面直角坐标系，把地图铺在区域 Ω 内，则从 Ω 内的点 x（公园中的地点）到地图上对应点 x' 的变换由下面的公式给出：

$$x' = f(x) := \lambda R x + b.$$

其中 R 和 b 分别为旋转和平移变换.

考虑 $\|\lambda R\| = \sup_{\|x\|=1} \|\lambda R x\| = \lambda < 1$，由 Banach 不动点定理可知，压缩映射 $f(x)$ 有唯一不动点 $a = f(a)$. □

例 8.5 (梯度下降的收敛性) 我们优化目标是寻找二阶可微凸函数 $f(x), x \in \mathbb{R}^n$ 的最小值. 使用梯度下降方法：每次往最小梯度方向移动. 假设对任意 $x \in \mathbb{R}^n$，

$$L \leq \lambda_{\min}(\nabla^2 f(x)) \leq \lambda_{\max}(\nabla^2 f(x)) \leq U.$$

其中 $\nabla^2 f(x)$ 是 f 的 Hessian 矩阵(二次导数)，$U \geq L > 0$ 为给定的常数，$\lambda_{\min}(A), \lambda_{\max}(A)$ 表示矩阵 A 的最小、最大特征值.

我们要证明：梯度下降能收敛到最小值点，且具有指数收敛速度.

先看一下证明的思路，我们要设法证明梯度下降算法是完备度量空间中的一个压缩映射. 首先，二阶可微凸函数的最小值点充分必要地满足 $\nabla f(x) = 0$. 其次，$\nabla f(x) = 0 \iff x \in \mathbb{R}^n$ 是梯度下降算子 $\mathcal{T}^{(\alpha)}$ 的不动点，其中 $\mathcal{T}^{(\alpha)} : x \mapsto x - \alpha \nabla f(x)$, 这里 $\alpha \in \mathbb{R}_+$ 为步长. 最后，$\mathcal{T}^{(\alpha)}$ 是一个完备度量空间的压缩映射，其压缩系数为 $q(\alpha) = 1 - L\alpha$. 因此梯度下降可以收敛至唯一的最小值点，收敛速度可以由压缩系数估计.

为了使 $q(\alpha)$ 确实一个压缩系数，我们需要 $\alpha < \min L^{-1}$. $\mathcal{T}^{(\alpha)}$ 的不动点恰好满足 $\nabla f(x) = 0$，因此是最小值点. 我们只需要证明 $\mathcal{T}^{(\alpha)}$ 是压缩映射，并给出压缩系数

由有限增量原理:

$$\left\| \mathcal{T}^{(\alpha)} x - \mathcal{T}^{(\alpha)} y \right\| \leq \sup_{z \in [x,y]} \left\| I - \alpha \nabla^2 f(z) \right\|_2 \cdot \|x - y\|_2 .$$

最后，注意到 $\left\| I - \alpha \nabla^2 f(z) \right\|_2$ 等于 $I - \alpha \nabla^2 f(z)$ 特征值的最大模，根据条件可知特征值的最大模 $\leq 1 - L\alpha$. □

§8.2 Brouwer 不动点定理

下面我们考虑更一般的度量空间中的不动点定理，为此我们需要引入连续映射的概念.

定义 8.3 设 X 和 Y 是度量空间 $(X, d_X), (Y, d_Y)$，映射 $f : X \to Y$ 在点 $a \in X$ **连续**，指的是

$$\forall \epsilon > 0 \exists \delta > 0 \forall x \in X (d_X(a, x) < \delta \Rightarrow d_Y(f(a), f(x)) < \epsilon).$$

如果它在每个点 $x \in X$ 连续，称 f 为**连续映射**. X 到 Y 的连续映射的集合记为 $C(X, Y)$.

当度量空间为欧氏空间时，连续映射的定义与欧氏空间中连续映射的定义相同. 接下来，我们还需要几个集合的概念.

定义 8.4 (开集、闭集和紧集) 考虑度量空间 (X,d), $a \in X$ 的邻域 $B(a,\delta) := \{x \in X | d(a,x) < \delta\}$.

- 集合 G 是**开集** G 指的是对于任何点 $x \in G$，满足 $B(x,\delta) \subset G$ 的邻域 $B(x,\delta)$ 存在.
- 集合 F 是**闭集**，如果它的补集 $X \setminus F$ 是 (X,d) 中的开集.
- 集合 K 是**紧集**，如果从 X 中任何覆盖 K 的开集族中可以选出有限个开集来覆盖 K.

当度量空间为欧氏空间时，开集和紧集的定义与欧氏空间中的定义相同，紧集等价于有界闭集. 后一条在一般的度量空间不一定成立！

有了上面的准备，我们就可以叙述 Brouwer 不动点定理了：

定理 8.2 (Brouwer 不动点定理) *设 $M \subset \mathbb{R}^n$ 是一个非空紧凸集，而 $F : M \to M$ 是一个连续函数. 则存在 $x \in M$ 使得 $F(x) = x$ 成立.*

Brouwer 不动点定理可以通过该实际的例子来理解：将一张白纸平铺在桌面上，再将它揉成一团（不撕裂），放在原来白纸所在的地方，那么只要它不超出原来白纸平铺时的边界，那么白纸上一定有一点在水平方向上没有移动过. 这个断言依据 Brouwer 不动点定理在 $\mathbb{R}^2$ 的情况，因为把纸揉皱是一个连续的变换过程.

另一个例子：大商场等地方可以看到的平面地图，上面标有“您在此处”的红点. 如果标注足够精确，那么这个点就是把实际地形映射到地图的连续函数的不动点.

下面我们看一个 Brouwer 不动点定理的应用例子. 首先引入矩阵**不可约**的概念：对于 n 阶方阵 A 而言，如果存在一个置换矩阵（通过交换单位阵的列获得）P 使得 $P^{\mathsf{T}}AP$ 为一个分块上三角阵，我们就称矩阵 A 是可约的，否则就称该矩阵是不可约的.

定理 8.3 (Perron-Frobenius 定理) *设 $A = (a_{ij})$ 为 $n \times n$ 不可约实矩阵，所有元素均非负，$a_{ij} \geq 0$，则下列结论成立.*

- *存在一个实特征值 r，其他特征值 λ 的模均不超过 r，即 $|\lambda| \leq r$.*
- *存在一个与 r 对应的特征向量，其所有元素恒正.*
- $\min_i \sum_j a_{ij} \leq r \leq \max_i \sum_j a_{ij}$.

证明. 首先证明 A 存在一个正的特征值 $r > 0$. 考虑单纯形 $S := \{x \in \mathbb{R}^n | x \geq 0, \sum_i x_i = 1\}$. 则 $\forall x \in S$，有 $Ax \geq 0$.

断言 $Ax > 0$，若不然，A 存在某一列全 0（由 $x \geq 0$ 和 A 非负可得）. 此时可通过置换阵将该 0 列交换到第一列，则得到的矩阵为分块上三角，与不可约性矛盾.

可以在 S 上定义映射

$$T(x) = \frac{1}{\rho(x)} Ax,$$

其中 $\rho(x) > 0$ 使得 $T(x) \in S$.

显然 $T(x)$ 是 $S \to S$ 的连续映射. S 是一个有界凸闭集. 由 Brouwer 不动点定理，存在 $x_0 \in S, x_0 = T(x_0) = \frac{1}{\rho(x_0)} Ax_0$.

令 $r = \rho(x_0)$，则可得 r 为 A 的一个正的特征值.

我们接下来证明，与 r 对应的特征向量所有元素恒正. 由之前的证明，与 r 对应的特征向量 $x_0 \in S$，则 $x_0 \geq 0$. 我们证明 $x_0 > 0$.

考虑 $A = PBP^{-1}$，其中 P 是置换矩阵，则

$$PBP^{-1}x_0 = rx_0 \implies B(P^{-1}x_0) = r(P^{-1}x_0).$$

记 $\tilde{x}_0 = P^{-1}x_0$. 取 B 使得 $\tilde{x}_0 = (\xi, 0)^\mathsf{T}, \xi > 0$. 则

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\xi \\ 0 \end{pmatrix}.$$

此时 $B_{21}\xi = 0$，由 $\xi > 0$ 可得 $B_{21} = 0$. 这与不可约矛盾，因此 $x_0 > 0$.

然后我们证明：若 α 是 A 的任意特征值，有 $|\alpha| \leq r$. 设 $0 \leq B \leq A, By = \beta y$. 记 $y^\star = |y| = (|y_i|)_i$. 于是有

$$|\beta| y^\star = |\beta y| = |By| \leq By^\star \leq Ay^\star.$$

由 A^T 不可约，存在特征值 $r_1 > 0$ 和特征向量 $x_1 > 0, A^\mathsf{T}x_1 = r_1 x_1$. 因此有

$$|\beta| x_1^\mathsf{T} y^\star \leq x_1^\mathsf{T} A y^\star = r_1 x_1^\mathsf{T} y^\star.$$

由 $x_1^\mathsf{T} y^\star > 0$，则 $|\beta| \leq r_1$. 令 $B = A$ 可得 $|\alpha| \leq r_1$，特别地 $r \leq r_1$. 同样有 $r_1 \leq r$，故 $r = r_1$.

最后证明：

$$\min_i \sum_j a_{ij} \leq r \leq \max_i \sum_j a_{ij}.$$

以这样的方式获得 $\tilde{A}$：将 A 的每一行都扩增（不减小某个元素），使得每一行都达到 $\max_i \sum_j a_{ij}$. 此时 $\max_i \sum_j a_{ij}$ 成为 A 的一个正特征值，且特征向量 $\tilde{x}_0 = \frac{1}{n} \cdot \mathbf{1} \in S$. 由之前

的结论，假设 $0 \leq A \leq \tilde{A}$，可以得到 $\tilde{A}$ 的正特征值 $\tilde{r} \geq r$. 因此 $r \leq \max_i \sum_j a_{ij}$. 同理缩小 A 可得 $\min_i \sum_j a_{ij} \leq r$. □

Perron-Frobenius 定理在 Markov 链中的有非常重要应用. 回忆 Markov 链的平稳分布：满足矩阵方程 $\pi = \pi P$ 和 $\sum_i \pi_i = 1$. 设该 Markov 链状态有限且对应的转移矩阵 P 是（非负实）不可约方阵. 由 Perron-Frobenius 定理，P 存在一个特征值 $1 = \min_i \sum_j a_{ij} \leq r \leq \max_i \sum_j a_{ij} = 1$，对应一个正特征向量 $x_0 \in S = \{x \in \mathbb{R}^n | x \geq 0, \sum_i x_i = 1\}$. 因此不可约有限状态 Markov 链必然存在平稳遍历分布.

§8.3 不动点的一般视角

第四部分

逻辑与博弈

第九章　动态博弈

本章我们讨论每个玩家需要操作多次的博弈，此时，博弈被称为**动态博弈**.

§9.1　输赢博弈

输赢博弈指的是玩家的收益只能取两个值（输或赢）的博弈. 赢博弈中，每个游戏状态只有一个玩家可以进行操作的情况研究最多. 这种情况通常称为**扩展式博弈**. 围棋、象棋、斗地主都是输赢博弈. 输赢博弈的分类见表 9.1.

二人	多人
输赢	输赢平
有限深	无穷深
完全信息	不完全信息
非合作	合作

表 9.1: 输赢博弈的分类.

例 9.1 斗地主是一个多人有限轮不完全信息合作输赢博弈.

我们在本部分主要关注最简单的一种博弈，即*完全信息确定性回合制博弈*，与之相关的概念如下：

- *局面*：博弈的状态包括博弈本身的状态（棋盘状态、出牌情况等）和当前回合是哪个玩家.
- （无记忆）*策略*：从局面到行动空间的映射 $s_i : C \to \mathcal{A}$.
- *确定性*：给定当前格局和所有玩家的行动，可以唯一确定下一回合的格局.

图 9.1: 斗地主.

- 完全信息：所有玩家都知道当前局面，都知道每个玩家的行动，并且这些是共同知识.

这样的博弈可以用博弈树表示出来，例如，井字棋的博弈树见图 9.2.

输赢博弈一个自然的问题是：玩家是否总可以获胜？这就涉及到必胜策略的概念：无论对手如何进行行动，玩家都可以取得胜利的策略. 必胜策略是一种解概念，即给定一个博弈，求解具有一定性质的玩家策略. 如果某个玩家具有必胜策略，那么我们就说这个博弈是被决定的. 什么博弈是被决定的？这一问题的答案由 Zermelo 定理给出.

定理 9.1 (Zermelo 定理, Von Neumann) 如果一个博弈是双人的、有限深的、确定的、完全信息的、输赢的，那么这个博弈是被决定的.

以上限定词缺一不可，缺少了任何一个都可能导致结论不成立.

证明. (证明一：逻辑证明) 设 W_i 表示“玩家 i 获胜”, $i = 1, 2$. 于是 $x \in W_1 \iff x \notin W_2$.

先手玩家有必胜策略当且仅当

$$\exists a_0 \forall b_0 \exists a_1 \forall b_1 \ldots \exists a_n \forall b_n : (a_0 b_0 \ldots a_n b_n) \in W_1.$$

后手玩家有必胜策略当且仅当

$$\forall a_0 \exists b_0 \forall a_1 \exists b_1 \ldots \forall a_n \exists b_n : (a_0 b_0 \ldots a_n b_n) \in W_2.$$

两个命题互为否定，因此二者恰有一个成立！ □

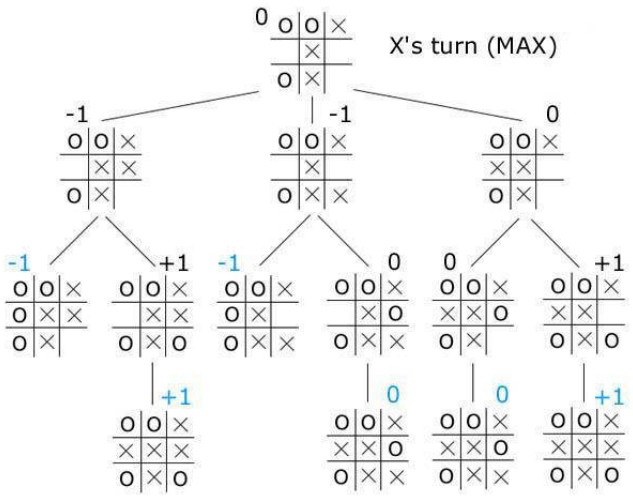


图 9.2: 井字棋的博弈树.

证明. (证明二：后向归纳法) 从博弈树的叶节点往根节点推理.

如果此节点是玩家 i 的回合，那么往后一轮的局面已经完全确定.

- 如果有一种走法使得玩家 i 必胜，那么玩家 i 选择这种走法即可.
- 否则，玩家 i 无论如何也不可能获胜.

当到达到根节点的时候，有一方有必胜策略，另一方必输.

这种证明方式被称为*后向归纳法*: 从最后一期开始往前推理，最终确定一个解概念.□

如果博弈的结局还有平局，我们有如下 Zermelo 定理:

定理 9.2 (有平局的 Zermelo 定理) *如果一个博弈是双人的、有限深的、确定的、完全信息的，博弈的结果有输赢平局三种，那么下面三条有且仅有一条成立:*

- *第一个玩家有必胜策略.*
- *第二个玩家有必胜策略.*
- *双方都有不败策略，因此完全理性的玩家在博弈中必然平局.*

证明留做练习.

尽管 Zermelo 定理的第二个证明构造出了必胜策略，但是后向归纳法的搜索空间过于庞大. 例如，充分大但有限的棋盘上，五子棋先手玩家存在不败策略，但是没有经过训练的人类或者简单的算法先手不一定会胜利. 究其原因，人的思考以及机器搜索的过程

实际上是前向探索的过程. 如何进行搜索是取得胜利重要的因素. 其中一个非常震撼的例子就是 AlphaGo 的出现，机器战胜了人类围棋高手. 以下我们介绍 AlphaGo 的设计思路.

由 Zermelo 定理可知，围棋也存在必胜策略. 然而标准围棋棋盘大小为 19×19，状态空间量级为 10^{170}，过大的状态空间使得我们无法使用后向归纳法求解出必胜策略. DeepMind 的 AlphaGo、AlphaZero利用深度强化学习的方法取得了围棋博弈的出色表现. 以下我们探讨 AlphaGo 如何通过神经网络建模博弈的过程.

AlphaGo 算法包含*策略网络*, *价值网络*和 *Monte-Carlo 树搜索*（MCTS）.

- 策略网络和价值网络的输入为当前局面状态 $s \in C$.
- 策略网络的输出为下一步落子位置 $a \in \mathcal{A}$（361 维的 one-hot 向量）.
- 价值网络的输出为该局面的价值评估 (期望收益: 输 -1/赢 $+1$).
- MCTS 利用策略网络进行*扩展*，使用价值网络进行*评估*，利用 UCB 公式返回最优的搜索结果作为落子决策.

AlphaGo 使用模仿学习（人类专家对弈数据）、强化学习（自博弈，策略梯度）的方式训练策略网络，使用自我博弈过程中的数据监督训练价值网络.

[lhy: 仔细讨论这部分关于输赢博弈的讨论

- 什么叫完全理性的玩家?
- 表示完整的策略需要多少比特?
- 是否有高效的算法计算必胜策略?
- 如果博弈多方不是完全对抗的（即零和），那么是否还有必胜策略? 是否有其他合理的解概念?

]

我们再看一个有趣的例子：*对话博弈*. 在对话博弈中，我们可以把对命题 ϕ 的辩论过程形式化为一个博弈. 博弈中有两个玩家，一个需要证明 ϕ 是真的，被称为*正方* P，一个需要说明 P 的论据是有矛盾的，它被称为*反方* O. 两个玩家可以对命题的某个部分发起*质疑*，或者对某个质疑作出*辩护*. 当正方成功辩护了所有的质疑，而反方已经无法再发出新的质疑，正方获胜；否则反方获胜.

我们以命题逻辑为例，考虑合取和蕴含. 感叹号 ! 表示陈述，问号 ? 表示询问. 当一个玩家 X（P 或者 O）说了一个合取式，另一个玩家 Y 如果想质疑，需要询问合取中的

陈述	质疑	辩护
$X!\varphi \wedge \psi$	$Y?L^{\wedge}$ 或 $Y?R^{\wedge}$	对应地，$X!\varphi$ 或 $X!\psi$

表 9.2: 对话博弈的规则：合取

某个部分（$L^{\wedge}$ 或 $R^{\wedge}$）. X 需要陈述该部分对应的命题作为辩护. 这一规则可以总结为表 9.2.

当一个玩家 X（P 或者 O）说了一个蕴含式，另一个玩家 Y 如果想质疑，需要陈述前提. X 则需要陈述结论作为辩护. 这一规则可以总结为表 9.3.

陈述	质疑	辩护
$X!\varphi \to \psi$	$Y!\varphi$	$X!\psi$

表 9.3: 对话博弈的规则：蕴含

我们考虑一个具体的例子 $(p \wedge q) \to p$. 用一个表格来表示辩论的过程，这个表格有两列，分别表示玩家 O 和 P. 每个玩家分别有三列，A 表示当前操作是第几步（两个玩家统一计数），B 表示当前操作质疑的是哪一步，中间一列表示当前的操作（陈述或者询问）.

O			P		
A		B	B		A

玩家 P 陈述要辩论的命题.

O				P	
				$!p \wedge q \to p$	0

玩家 O 质疑这一陈述.

O				P	
				$!p \wedge q \to p$	0
1	$!p \wedge q$	(0)			

现在又一次轮到了玩家 P，他可以选择为蕴含式辩护，或者质疑这个合取式. 我们假设他这次选择质疑合取式，那么他需要询问左边或者右边，假设他询问了左边：

O			P		
				$!p \wedge q \to p$	0
1	$!p \wedge q$	(0)			
			(1)	$?L^{\wedge}$	2

现在轮到了玩家 O. 他已经没有别的可以进行的操作了，只能对操作 2 进行辩护.

O			P		
				$!p \wedge q \to p$	0
1	$!p \wedge q$	(0)			
3	$!p$		(1)	$?L^{\wedge}$	2

现在轮到了玩家 P. 他已经没有别的可以进行的操作了，只能对操作 1 进行辩护. 因为玩家 O 已经陈述了 p，所以他可以用这个陈述来辩护.

O			P		
				$!p \wedge q \to p$	0
1	$!p \wedge q$	(0)		$!p$	4
3	$!p$		(1)	$?L^{\wedge}$	2

现在轮到了玩家 O. 他已经不能操作了（没有可以质疑的，也没有可以辩护的），所以玩家 P 获胜.

O			P		
				$!p \wedge q \to p$	0
1	$!p \wedge q$	(0)		$!p$	4
3	$!p$		(1)	$?L^{\wedge}$	2

我们还可以定义否定 $\neg p$ 相关的辩论规则，留作练习.

根据 Zermelo 定理，对话博弈一定有一人有必胜策略，我们还有更精细的定理：

定理 9.3 *考虑对命题 ϕ 的对话博弈，ϕ 是重言式当且仅当正方玩家 P 有必胜策略.*

证明只需要考虑对 ϕ 做归纳法. 实际上，我们如此规定对话博弈的规则，就是为了保证这一定理成立. 我们可以将一个命题真值的判定问题转化为玩家 P 博弈必胜策略的存在性问题，这对于一阶逻辑来说非常有用.

§9.2 随机博弈（Markov 博弈）

现在我们考虑无穷博弈中最简单的一种：**随机博弈**，也叫 **Markov 博弈**. 在随机博弈中，玩家的行动是随机的，但是玩家的行动空间是有限的. 为了简化问题，我们考虑两人随机博弈，即两个玩家轮流进行随机行动. 其相关概念如下：

- 有限局面：$C = \{s_1, s_2, \cdots, s_N\}$.

- 有限策略：$\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 \times \mathcal{A}_2$.
  - 每个局面具有自己的行动空间：$\mathcal{A}_p = \{\mathcal{A}_{p,1}, \mathcal{A}_{p,2}, \cdots, \mathcal{A}_{p,N}\}, (p = 1, 2)$.
  - 每个行动空间有限：$|\mathcal{A}_{p,k}| = n_{p,k}, (p = 1, 2; k = 1, 2, \cdots, N)$.
- 在局面 s_k，若玩家 1 选择第 i 个行动 $a_{1,k,i}(1 \leq i \leq n_{1,k})$，玩家 2 选择第 j 个行动 $a_{2,k,j}(1 \leq j \leq n_{2,k})$，则
  - 局面之间有转移概率：
    - 该博弈以概率 s_{ij}^k 停止.
    - 该博弈以概率 p_{ij}^{kl} 转移到状态 s_l.
  - 收益：玩家 1 收获 $Q(a_{1,k,i}, a_{2,k,j}; s_k)$，玩家 2 收获 $-Q(a_{1,k,i}, a_{2,k,j}; s_k)$. 假设 Q 有界.

随机博弈的过程如下. 首先，博弈从某一个局面状态 s^0 开始，$s^0 \in C$. 在每个阶段 t，所有玩家同时选择自己的动作 a^t. 环境根据所有玩家的动作 $\boldsymbol{a}^t$ 和状态 s^t，给予每个玩家对应的收益 $q(\boldsymbol{a}^t, s^t)$，并转移到新的状态 $s^{t+1} \in C$.

假设在阶段 T，所有玩家可以观察到所有历史动作 $\{\boldsymbol{a}^t\}_{t \leq T}$. 和一般的动态博弈一样，我们可以定义每个玩家的策略 π——基于历史信息（状态、行动）到当前局面的行动的映射. 玩家在博弈的过程中，其实就是按照某个策略 π 进行行动的. 求解一个博弈也是求解最优策略 π_*. 下面我们定义什么是“最优”.

依赖历史信息的策略 π 一般很复杂. 由于收益只与当前局面、当前玩家的行动有关，我们可以缩小策略空间. 考虑第 p 个玩家 $(p = 1, 2)$，定义*平稳策略*为 N 个概率分布：$\vec{\pi}_p = (\pi_p^1, \pi_p^2, \cdots, \pi_p^N)$，分别对应 N 个状态；每个概率分布 $\pi_p^k = (\pi_{p,1}^k, \pi_{p,2}^k, \cdots, \pi_{p,n_{p,k}}^k)$，分别对应 $|n_{p,k}|$ 个行动. 使用平稳策略时，无论博弈的历史轨迹如何，玩家 p 在状态 s_k 采取行动 $a_{p,k,i}$ 的概率为 $\pi_{p,i}^k$.

假设两个玩家分别用平稳策略 π_1, π_2 进行博弈，则从局面 s^0 开始的随机博弈中，第 p 个玩家（$p = 1, 2$）的*远期收益*：

$$\Pi_p(\pi_1, \pi_2; s^0) = \mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{\infty} \gamma^t (-1)^{p-1} Q(\pi_1(s^t), \pi_2(s^t); s^t)\right].$$

以上定义容易扩展为一般随机博弈（多人、非零和）. 随机博弈可以看做 MDP 的多人扩展 $(N, C, \mathcal{A}, \mathcal{P}, \mathcal{Q}, \gamma)$：

- N: 玩家的数量，$N = 1$ 退化为 MDP.

- C: 局面的集合.
- $\mathcal{A}$: 玩家的行动集合. $\mathcal{A} = \mathcal{A}^1 \times \cdots \mathcal{A}^N$. 设 $\mathcal{A}_i(s)$ 表示第 i 个玩家在状态 s 的行动空间.
- $\mathcal{P} : C \times \mathcal{A} \times C \to [0,1]$: 给定玩家的联合动作 $\boldsymbol{a} \in \mathcal{A}$, 局面从状态 $s \in C$ 转移到 $s' \in C$ 的概率 $P(s'|s,\boldsymbol{a})$.
- $\mathcal{Q} : C \times \mathcal{A} \to \mathbb{R}$: 在状态 s，当玩家的联合动作为 $\boldsymbol{a}$ 时，玩家 i 的奖励值 $Q_i(\boldsymbol{a};s)$（有界）.
- $\gamma \in [0,1]$ 表示折扣系数，用于计算远期收益.

Markov 完美均衡（MPE）是一种解概念. 求解博弈的过程中，我们限制所有玩家使用平稳策略. 此时，面对对手，玩家的最优策略被称为 *Markov 最优反应*：对每个状态 s，给定其他玩家的平稳策略 π_{-i}，玩家 i 的行动 $a_i \in \mathcal{A}_i(s)$ 最大化它的远期收益 $\Pi_i(s;\pi_{-i})$:

$$\Pi_i(s;\pi_{-i}) = \mathbb{E}\left[Q_i(a_i,\pi_{-i}(s);s) + \gamma \sum_{s'\in C} P(s'|a_i,\pi_{-i}(s),s)\Pi_i(s';\pi_{-i})\right].$$

MPE 被定义为：所有玩家的平稳策略组合，其中每个玩家的行动都是 Markov 最优反应.

我们可以类比 MDP 中求解最优价值的 Bellman 方程（动态规划）的形式. 当假设其他玩家都使用平稳策略，对每个状态 s，存在一个价值函数 $V_i(s;\pi_{-i})$ 取得玩家 i 从 s 出发的最高远期收益，满足:

$$\begin{aligned} V_i(s;\pi_{-i}) = \max_{a_i\in\mathcal{A}_i(s)} \mathbb{E}[&Q_i(a_i,\pi_{-i}(s);s) \\ &+ \gamma \sum_{s'\in C} P(s'|a_i,\pi_{-i}(s),s)V_i(s';\pi_{-i})]. \end{aligned}$$

定理 9.4 *对于 N 个玩家、有限局面状态、有限动作空间的随机博弈，MPE 存在.*

下面我们介绍 Shapley 关于双人零和随机博弈情形的证明. 对于一般的情况，我们留做习题.

首先介绍一下*矩阵博弈*的概念. 假设 P 是一个 $m \times n$ 的矩阵，玩家 1 有 m 种动作 (动作集合 $\mathcal{A}_1$)，玩家 2 有 n 种动作 (动作集合 $\mathcal{A}_2$)，元素 P_{ij} 表示双方采取动作 (i,j) 时玩家 1 的收益，玩家 2 的收益为 $-P_{ij}$.

回忆在不动点课程中的 minimax 定理**??**:

$$\mathsf{val}(P) = \max_{s_1\in\Delta(\mathcal{A}_1)} \min_{s_2\in\Delta(\mathcal{A}_2)} s_1^\top P s_2 = \min_{s_2\in\Delta(\mathcal{A}_2)} \max_{s_1\in\Delta(\mathcal{A}_1)} s_1^\top P s_2.$$

s_i 是玩家 i 的混合策略，$\Delta(\mathcal{A}_i)$ 表示玩家 i 所有混合策略的集合. $\mathsf{val}(P)$ 为矩阵 P 定义的*矩阵博弈的值*. 在任意 Nash 均衡中，玩家 1 的期望收益即为 $\mathsf{val}(P)$. 下面我们将看到：双人零和随机博弈也存在值（即可定义均衡收益）.

首先证明一个引理：

引理 9.1 *对任意 $m \times n$ 的矩阵 B, C，成立：*

$$|\mathsf{val}(B) - \mathsf{val}(C)| \le \max_{i,j} |B_{ij} - C_{ij}|.$$

证明. 设 (s_1, s_2) 为矩阵博弈 B 的 Nash 均衡，$(\bar{s}_1, \bar{s}_2)$ 为矩阵博弈 C 的 Nash 均衡. 于是由定义有：$s_1^\top B \bar{s}_2 \ge s_1^\top B s_2$，且 $\bar{s}_1^\top C \bar{s}_2 \ge s_1^\top C \bar{s}_2$，因此

$$s_1^\top B s_2 - \bar{s}_1^\top C \bar{s}_2 \le s_1^\top B \bar{s}_2 - s_1^\top C \bar{s}_2 \le \max_{i,j} |B_{ij} - C_{ij}|.$$

□

下面，我们将矩阵博弈的概念迁移到随机博弈. 在双人零和的语境下，我们去掉收益函数 Q 的下标 i. 定义*值迭代*为以下过程：

- 首先，我们选择一个任意的函数 $\alpha : C \to \mathbb{R}$，其中 C 是局面的状态空间，称 α 为*值函数*（value function）.
- 对任意 $s \in C$，定义矩阵 $R_s(\alpha)$ 为

  $$R_s(\alpha)(a_1, a_2) = Q(a_1, a_2; s) + \gamma \sum_{s' \in C} P(s' | a_1, a_2, s) \alpha(s').$$

  其中 $a_1 \in \mathcal{A}_1(s), a_2 \in \mathcal{A}_2(s)$.
- 值函数从 α_0 开始迭代，记 $\alpha_k(s) = \mathsf{val}(R_s(\alpha_{k-1}))$.

如何理解 $\alpha_k(s)$? 假设选取 $\alpha_0(s) \equiv 0$，则 $R_s(\alpha_0) = Q(a_1, a_2; s)$ 是从 s 出发，由 Q 定义的矩阵博弈. $\alpha_1(s) = \mathsf{val}(R_s(\alpha_0)) = \mathsf{val}(Q(\cdot, \cdot; s))$.

再看 $R_s(\alpha_1)(a_1, a_2) = Q(a_1, a_2; s) + \gamma \sum_{s' \in C} P(s' | a_1, a_2, s) \alpha_1(s')$. 我们可以假想有一个被截断的两阶段随机博弈：

- 玩家在第一阶段从状态 s 出发，行动 (a_1, a_2) 待定；
- 在第二阶段，对于每个可能的状态 $s' \in C$，玩家采用矩阵博弈 $R_{s'}(\alpha_0)$ 的 Nash 均衡的行动.

博弈在第二阶段终止，远期收益累积的折扣部分为 $\gamma \sum_{s' \in C} P(s'|a_1, a_2, s)\mathsf{val}(R_{s'}(\alpha_0))$. 从而，矩阵博弈 $R_s(\alpha_1)$ 的值也是这个两阶段随机博弈的值. 更一般地，$\alpha_k(s)$ 是一个被截断的 k 阶段随机博弈的值.

为方便，我们定义迭代算子 $(T\alpha)(s) = \mathsf{val}(R_s(\alpha))$.

$$\begin{aligned}
\left\|T\alpha - T\alpha'\right\|_\infty &= \max_{s \in C} \left|\mathsf{val}(R_s(\alpha)) - \mathsf{val}(R_s(\alpha'))\right| \\
&\leq \gamma \max_{s \in C} \max_{a_1, a_2} \left| \sum_{s' \in C} P(s'|a_1, a_2, s)(\alpha(s') - \alpha'(s'))\right| \\
&\leq \gamma \max_{s' \in C} \left|\alpha(s') - \alpha'(s')\right| \\
&= \gamma \left\|\alpha - \alpha'\right\|_\infty .
\end{aligned}$$

第一个不等式的成立使用了矩阵博弈值的不等式. 对于有折扣的博弈，$\gamma \in (0,1)$，因此 T 是一个压缩映射，由 Banach 不动点定理可知，$\alpha_k \to \alpha^*$ 满足 $T\alpha^* = \alpha^*$.

考虑任意一个从 s 出发的双人零和随机博弈，在前 k 局的博弈中，玩家 1 采用最优策略，后续局面可选择任意动作. 由之前的分析可知，前 k 局构成的截断随机博弈远期收益为 $\alpha_k(s)$. 而对于之后的博弈，玩家 1 损失的累积收益最差不超过 $\gamma^k/(1-\gamma) \cdot \sup|Q|$. 因此，当 $k \to \infty$ 时，玩家 1 的收益至少是 $\alpha^*(s)$. 注意，这个下界是无视玩家 2 的行动得出来的.

另一方面，玩家 2 也可以确保自己的收益至少是 $-\alpha^*(s)$. 由零和，因此均衡时玩家 1 的收益必定是 $\alpha^*(s)$. 因此双人零和随机博弈的均衡收益（值）为 $\alpha^*(s), s \in C$.

这样，我们就证明了 MPE 的存在性.

以上我们只说明了双人零和随机博弈的值存在，还没有指明最优策略如何取得. 类比矩阵博弈，我们有：

定理 9.5 *$R_s(\alpha^*)$ 定义的矩阵博弈的最优策略 (π_1, π_2) 是随机博弈的 MPE.*

证明. 固定玩家 2 的一个任意策略 $\hat{\pi}_2$（不一定是平稳策略）. 首先考虑一个 k 阶段截断博弈，我们定义 $\alpha_0 = \alpha^*$，可理解为，原博弈前 k 步动作待定，后面使用策略取得 α^* 的远期收益.

在这个博弈中，玩家 1 可以无视玩家 2 的策略，确保至少取得 α^* 的远期收益（已证明），因此若采用 π_1 也能取得:

$$\mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{k-1} \gamma^t Q(\pi_1(s^t), \hat{\pi}_2(s^t); s^t) + \gamma^k \alpha^*(s^k) \middle| s^0 = s\right] \geq \alpha^*(s).$$

化简可得

$$\mathbb{E}\left[\sum_{t=0}^{k-1} \gamma^t Q(\pi_1(s^t), \hat{\pi}_2(s^t); s^t) \middle| s^0 = s\right] \geq \alpha^*(s) - \gamma^k \left\|\alpha^*\right\|_\infty .$$

因此

$$\Pi(\pi_1, \hat{\pi}_2; s) \geq \alpha^*(s) - \gamma^k \|\alpha^*\|_\infty - \frac{\gamma^k}{1-\gamma} \sup |Q|.$$

同样地，令 $k \to \infty$ 可得，上式 R.H.S. 趋于 $\alpha^*(s)$. 对于玩家 2 的 π_2 证明对称，因此 (s_1, s_2) 是一个 MPE. □

随机博弈在机器学习中对应着*多智能体强化学习*（MARL），正如 Markov 决策过程对应着（单智能体）强化学习. MARL 是多智能体系统（MAS）研究领域中的一个重要分支，它将强化学习技术、博弈论等应用到多智能体系统，使得多个智能体能在更高维且动态的真实场景中通过交互和决策完成更错综复杂的任务. 解 MDP 的过程是根据环境信息，优化决策，最大化远期收益，这是单智能体强化学习. 解随机博弈的过程，是在 MDP 的基础上引入多玩家，玩家有自己的效用函数，最大化自己的远期收益，这是多智能体强化学习.

第十章　静态博弈

本章我们讨论静态博弈的基本概念和分析方法，并以此为基础，讨论博弈中认知相关的问题.

§10.1　正则形式博弈

动态博弈通常被建模为*扩展形式博弈*. 与之相对的是*正则形式博弈*，即玩家只有一次行动的机会，所有玩家同时操作. 正则博弈通常要求信息是完全的. 这种博弈的过程与时间无关，属于*静态博弈*.

一个正则形式博弈有如下构成要素

- 玩家集合：I，我们总是假设这是一个有限集合.
- 玩家的行动集（纯策略集）：A_i，$i \in I$.
- 玩家的收益：$u_i : \prod_j A_j \to \mathbb{R}$.
- 完全信息：以上内容是所有玩家的共同知识.

所有人的策略拼在一起，即 $s = (s_i)_{i \in I}$，构成博弈的*策略组合*. 有以下特殊的正则博弈：

- 当 A_i 有限，我们称之为*矩阵博弈*.
- 当 A_i 和 u_i 都是连续的，我们称之为*连续博弈*.
- 当 $\sum_i u_i = 0$，我们称之为*零和博弈*，当所有策略组合，收益和都是常数时，解概念的分析可以保持一致，我们也可以按零和处理.

如何定义正则博弈的均衡？首先要明确均衡的概念. 假设所有人之间是不能交流的，每个人独立做决策. 因此玩家之间不能协调彼此的决策. 因为只能行动一次，所以所谓*均衡*，指的是没有人对自己的决策感到后悔的状态，没有人可以通过改变自己现在的策略来获得更多的收益. 因此我们有如下定义：

定义 10.1 (Nash 均衡)（纯策略）**Nash 均衡**指的是策略组合 s，满足

$$\forall i \in I \forall a_i \in A_i : u_i(s_i, s_{-i}) \geq u_i(a_i, s_{-i}).$$

我们也可以用不动点来理解 Nash 均衡. 首先定义*最优反应*：给定对手的策略 s_{-i}，玩家 i 选择的最大化自己收益的策略 s_i. Nash 均衡的等价定义是每个人都达到了自己的最优反应，即最优反应的不动点.

例 10.1 (囚徒困境) 考虑一个经典的非合作博弈，*囚徒困境*. 一共有两个玩家，行玩家和列玩家. 玩家的第一个选择是保持沉默，第二个选择是认罪并检举对方. 它有如下收益矩阵：

$$\begin{pmatrix} -1,-1 & -10,0 \\ 0,-10 & -5,-5 \end{pmatrix}.$$

矩阵每一项第一个元素是行玩家的收益，第二个是列玩家的收益. 这个博弈有唯一的 Nash 均衡：每个人都认罪. 思考：打破 Nash 均衡的假设，有没有可能得到更好的结果? □

然而，纯策略 Nash 均衡并不一定存在. 考虑如下的输赢（零和）博弈：猜硬币游戏. 行列玩家分别有一枚硬币，他们秘密地抛掷. 如果两个玩家的硬币上面相同，行玩家获胜；否则列玩家获胜. 收益矩阵为：

$$\begin{pmatrix} 1,0 & 0,1 \\ 0,1 & 1,0 \end{pmatrix}.$$

容易验证，这个博弈没有纯策略 Nash 均衡. 更一般地，二人正则输赢博弈中纯策略 Nash 均衡往往不存在. 我们有如下定理：

定理 10.1 *设 $G = (I, \{A_i\}_{i\in I}, \{u_i\}_{i\in I})$ 是一个二人正则输赢博弈，其中 $I = \{1,2\}$. 那么，G 存在纯策略 Nash 均衡当且仅当其中一个玩家存在必胜策略.*

对比动态博弈中的 Zermelo 定理，静态的二人完全信息输赢博弈已经不能够保证必胜策略的存在性. 因此，静态输赢博弈的结局往往比动态输赢博弈更加不确定. 我们可以利用这一事实去理解生成对抗网络模型的不稳定性.

§10.1.1 生成对抗网络

生成对抗网络（GAN）有两个子模型组成，一个被称为*生成模型*，一个被称为*判别模型*. 生成模型的任务是生成看似真实的数据，二判别模型的任务是识别给定的数据是真实的还是伪造的.

假设真实数据的分布为 F_{data}. 生成模型为 $G(x;\theta_g)$，参数为 θ_g，输入向量 x，输出数据向量 z. 当 x 服从分布 F_x，G 的输出会形成一个分布 F_g. 判别模型为 $D(z;\theta_d)$，参数为 θ_d，接受一个数据向量 z，输出一个 $[0,1]$ 中的实数，表示 z 来自分布 F_{data} 的概率. 我们假设 F_{data} 和 F_x 都是连续型分布，有密度函数 p_{data} 和 p_x. 我们再假设 D 和 G 都是连续的.

将 G 和 D 看成两个玩家，于是 GAN 可以被看成一个二人零和博弈，收益函数为:

$$V(G,D)=\mathbb{E}_{z\sim F_{data}}(\log D(z))+\mathbb{E}_{x\sim F_x}(\log(1-D(G(x)))).$$

D 最大化 V，G 最小化 V.

从博弈论角度出发，一个基本的问题是 Nash 均衡是否存在? 假设 D 和 G 都可以任意选择连续函数. 我们将展示一种通用的方式求解连续博弈的 Nash 均衡. 注意到 $G(x)$ 形成了一个连续分布，密度记为 p_g. 首先证明密度函数存在性定理:

定理 10.2 *设 $X\sim\mathcal{U}(0,1)$. 对于任意密度函数 p，存在一个连续函数 F 使得 $F(X)$ 具有密度 p.*

证明. 设 F_p 是 p 对应的分布函数，它是一个单调的连续函数. 取 $F(x)=\inf\{y\in\mathbb{R}: F_p(y)\geq x\}$ 即可. □

因此，G 的行动等价于选择 p_g.

给定 G 的选择 p_g，我们来求 D 的最优反应 D^*.

$$V(G,D)=\int(p_{data}(x)\log D(x)+p_g(x)\log(1-D(x)))\mathrm{d}x.$$

函数 $a\log x+b\log(1-x)$ 最大值在 $x=a/(a+b)$ 的时候取得. 因此，

$$D^*(x)=\frac{p_{data}(x)}{p_{data}(x)+p_g(x)}.$$

现在，给定最优反应 $D^*=p_{data}(x)/(p_{data}(x)+p_g(x))$，我们来求 G 的最优反应. 直观上，G 能做到的最好选择就是 $p_g=p_{data}$. 此时，$D^*(x)=1/2$，因此对任意 G，$V(G,D^*)=-\log 4$. G 选任何策略都是一样的收益，因此这是一个 Nash 均衡. 我们证明了:

定理 10.3 (GAN 的 Nash 均衡存在性) *在 GAN 的博弈中，G 选择 p_{data}，D 选择 $1/2$ 是一个 Nash 均衡.*

我们刚刚的分析过于理想化，需要考虑一些问题. 首先，神经网络的大小是有限的，因此 G 不能选择任何 p_g. 因此，我们刚刚找到的 Nash 均衡可能不存在. 其次，p_{data} 是一个未知的量，我们只有一些样本. 因此，G 和 D 都需要一个算法来找到它们的最优策略. 这就是训练 GAN 的过程.

我们接下来给出一种更符合实际的均衡概念.

局部 Nash 均衡 (G^*, D^*) 是指在 G^* 和 D^* 的一个邻域内 (G^*, D^*) 形成了一个 Nash 均衡. *稳定局部 Nash 均衡* (G^*, D^*) 是指 (G^*, D^*) 是一个局部 Nash 均衡，并且在 (G^*, D^*) 的一个邻域内，对任意 (G, D) 都有 $V(G, D^*) \geq V(G, D)$ 和 $V(G^*, D) \leq V(G, D)$. GAN 的训练实际上就是在寻找稳定局部 Nash 均衡的过程.

稳定局部 Nash 均衡表明了，即便对手的策略具有（很小的）不确定性，玩家的策略依然是最优反应. 在训练过程中，这样的不确定性很可能出现，源自精度或者误差. 因此，稳定局部 Nash 均衡是一个更有可能被找到的解，不稳定局部 Nash 均衡则很容易偏离. 然而，我们刚刚在理想条件下找到的 Nash 均衡其实也是不稳定的. 实际上，GAN 的训练是一个非常不稳定的过程. 我们有如下结果：

定理 10.4 *设 GAN 博弈的收益函数 V 是解析的，$(0, 0)$ 是稳定局部 Nash 均衡，在 $(0, 0)$ 的一个邻域内，$V(G, D) = C + V^2 f(V) + D^2 g(D) + V^2 D^2 h(G, D)$，其中 f, g, h 都是解析函数，满足 $f(0), g(0) \geq 0$，C 是常数.*

V 要具备这种形式才可能有稳定局部 Nash 均衡. 然而一般的神经网络并不能具备这样的形式，所以很多情况下根本不存在稳定局部 Nash 均衡！

§10.1.2 混合策略

我们已经看到，在相当普遍的情况下，纯策略 Nash 均衡并不存在. 所以我们需要允许玩家进行随机行动，这就是**混合策略**. 混合策略就是建立在纯策略空间 S 上的一个概率分布. 混合策略空间记为 $\Delta(S)$. 当 S 有 n 个元素（有限），$\Delta(S)$ 可以被表示为标准的 n-单纯形：

$$\Delta(S) = \left\{ x \in \mathbb{R}^n : \sum_{i=1}^{n} x_i = 1, x_j \geq 0, \forall j \right\}.$$

那么，有了混合策略，玩家的决策思考过程是怎么样的？一个非常标准的回答是*期望效用理论*，它由 Von Neumann 和 Morgenstern 提出. 该理论认为，在面对不确定性时，人按照期望效用进行决策. 因此，我们需要计算玩家的期望效用. 为此，引入*混合策略组合*：$\sigma = (\sigma_i)_{i \in I}$，其中 $\sigma_i \in \Delta(A_i)$. σ 是一个 $(A_i)_{i \in I}$ 上的概率分布，每一维相互独

立. 当所有玩家选定策略之后，玩家 i 的期望收益是：

$$u_i(\sigma) = \mathbb{E}_{a\sim\sigma} u_i(a).$$

定义 10.2 (Nash 均衡) 对于一个博弈 $G = (I, \{A_i\}_{i\in I}, \{u_i\}_{i\in I})$，混合策略 Nash 均衡 σ 满足对于任意玩家 i 和任意 $\sigma_i' \in \Delta(A_i)$，都有

$$u_i(\sigma_i, \sigma_{-i}) \geq u_i(\sigma_i', \sigma_{-i}).$$

Nash 著名的定理是：

定理 10.5 (Nash 均衡存在性定理) *对于任意有限正则形式博弈，都存在一个混合策略 Nash 均衡.*

我们来看一个例子.

例 10.2 继续考虑猜硬币游戏，收益矩阵为

$$\begin{pmatrix} 1,0 & 0,1 \\ 0,1 & 1,0 \end{pmatrix}.$$

容易证明，唯一的均衡是两个玩家都选择 $(1/2, 1/2)$. □

尽管在数学上，混合策略是导出了漂亮的结果，但是混合策略并不是一个非常合理的概念. 如何理解混合策略？我们将在后面通过似然、知识论等方式来解释混合策略.

§10.2 不完全信息博弈（Bayes 博弈）

即便是纯策略 Nash 均衡也可能是不合理的状态. 考虑如下的二人博弈：

$$\begin{pmatrix} 1,1 & 0,0 \\ 0,0 & 0,0 \end{pmatrix}.$$

显然，两个人玩家都选择第二策略达到了 Nash 均衡. 然而，当行玩家对列玩家的选择有任意小的不确定性时，他都更倾向于选择第一个策略. 因此，我们给出的这个 Nash 均衡实际上描述了一种不太可能出现的状态. 这促使我们提出了所谓的*颤抖的手完美化*：s 是一个纯策略 Nash 均衡，并且当对手玩家的策略有任何微小不确定性的时候，s 中的策略依然是最优反应.

“颤抖的手”给了我们一个例子说明不确定性会影响玩家的决策. 那么如何量化不确定性? 经济学的解决方案是 *Bayes* 解释的概率论: 每一个玩家对世界有一个先验的信念, 信念在数学上被建模为对可能世界的概率分布.

利用这样的建模, 我们可以给不完全信息博弈一个正式定义. 一个不完全信息博弈有如下组成部分:

- 玩家集合: I.
- 行动空间: $A = (A_i)_{i\in I}$, A_i 表示玩家 A_i 的所有可能行动.
- 类型空间: $\Theta = (\Theta_i)_{i\in I}$, Θ_i 表示玩家 i 的所有可能类型.
- 收益函数: $u_i : A \times \Theta \to \mathbb{R}$, 当所有人的行动和类型都确定的时候, 玩家 i 能拿到的收益.

所有玩家的行动 $a = (a_i)_{i\in I}$ 形成了一个行动组合. 所有玩家的类型 $\theta = (\theta_i)_{i\in I}$ 形成了一个类型组合.

$P_i \in \Delta(\Theta_i)$ 是玩家 i 类型的概率分布. P_i 表示了其他玩家对玩家 i 类型的信念. 我们假设 P_i 是相互独立的, 因此玩家 i 对其他玩家的信念是 $P_{-i} = \prod_{j\neq i} P_j$. 玩家 i 知道自己的类型.

在使用这一定义的时候需要非常小心, 在一般情况下, 玩家 i 对这个世界的信念应该包含:

- 其他玩家有谁;
- 自己和对手可能的行动;
- 自己的类型;
- 自己的收益函数;
- ……

然而, 在上述标准的经济学模型中, 我们做了如下严格的限制:

- 玩家、可能行动、可能类型、收益函数是所有人的共同知识, 没有人对这些东西有不一样的信念.
- 玩家对世界的不确定性仅仅在于其他玩家的类型, 而且所有人关于每个玩家类型的信念是一致且独立的.

- 自己的类型自己知道并且只有自己知道.

下面我们看一个例子

例 10.3 (合作者) 考虑一个二人博弈,称为"工作-偷懒"博弈. 两个人的行动都是"工作"(W)或"偷懒"(S). 行玩家的类型集合是单点集，列玩家的类型是"勤奋"(D)或"懒惰"(L). 收益矩阵为

$\theta_2 = D$,

	W	S
W	$3,3$	$-1,0$
S	$2,1$	$0,0$

$\theta_2 = L$,

	W	S
W	$1,1$	$-1,2$
S	$2,-1$	$0,0$

□

在具有不确定性的世界中，玩家的策略如何定义？玩家如何决策？因为玩家知道自己的类型，但在决策的时候不能知道其他人的类型，所以一个完整的（纯）策略应该是 $s_i : \Theta_i \to A_i$，即在给定自己的类型时，应该采取的行动.

关于收益，我们依然沿用期望效用理论. 当玩家 i 具有类型 θ_i，采取行动 a_i，对手的策略是 s_{-i} 时，i 的中期期望收益为:

$$\tilde{u}_i(a_i, \theta_i, s_{-i}) = \mathbb{E}_{\theta_{-i} \sim P_{-i}}[u_i(a_i, s_{-i}(\theta_{-i}), \theta_i, \theta_{-i})].$$

利用期望效用理论，我们很容易定义均衡的概念:

定义 10.3 (Bayesian Nash 均衡，BNE) $s = (s_i)_{i \in I}$ 被称为 *Bayesian Nash 均衡*，如果

$$\tilde{u}_i(s(\theta_i), \theta_i, s_{-i}) \geq \tilde{u}_i(a_i, \theta_i, s_{-i})$$

对任意 i, θ_i, a_i 都成立.

我们也可以考虑前期期望收益，此时玩家 i 并不知道自己是什么类型，因此他也要对自己的类型求期望:

$$\hat{u}_i(s_i, s_{-i}) = \mathbb{E}_{\theta \sim P}[u_i(s_i(\theta_i), s_{-i}(\theta_{-i}), \theta_i, \theta_{-i})].$$

根据前期期望收益，我们也可以定义 BNE 为:

$$\hat{u}_i(s_i, s_{-i}) \geq u_i(s_i', s_{-i})$$

对任意 i 和任意策略 s_i' 成立.

两个定义是等价的. 首先，前期期望收益是中期期望收益的加权平均. 然后，最大化前期期望收益等价于最大化平均中的每一项中期期望收益，也就是最大化中期收益. 所以这两者是等价的.

当所有的不确定性都消失的时候，我们得到的收益是真实的，被称为后期收益. 前期、中期、后期分别表明了信息的确定程度.

注. 自然，我们也可以定义混合策略的 BNE，此时策略 s_i 是一个 Θ_i 到 $\Delta(A_i)$ 的映射.

例 10.4 (猜硬币游戏的 BNE) 考虑猜硬币游戏：

	H	T
H	$1,-1$	$-1,1$
T	$-1,1$	$1,-1$

如果两个人都出 H 的时候收益有微小的扰动，我们就得到了一个 Bayes 博弈：

	H	T
H	$1+\epsilon\theta_1,-1+\epsilon\theta_2$	$-1,1$
T	$-1,1$	$1,-1$

其中 $\theta_i \sim \mathcal{U}[-1,1]$.

考虑策略：$s_i : [-1,1] \to \{H,T\}$ 满足

$$s_i(\theta_i) = \begin{cases} H, & \theta_i \in [0,1], \\ T, & \theta_i \in [-1,0). \end{cases}$$

容易证明，(s_1,s_2) 是一个 BNE. □

注意到，在上面的例子中，策略 (s_1,s_2) 导致的结果实际上是，每个玩家以等概率选择 H 和 T. 当 $\epsilon \to 0$，这个博弈收益矩阵回到了原始博弈. BNE 形成的行动概率分布则趋于原始博弈的混合策略. 通过这样的办法，正则博弈的混合策略均衡被理解为：当不确定性趋于消失时候，BNE 形成的行动概率分布. 这不是偶然的，实际上所有的正则博弈的混合策略均衡都可以用一系列（纯策略的）BNE 纯化.

考虑一个正则博弈 (I,A,u). 给定一个扰动参数 $\epsilon > 0$，定义类型为 $\theta = (\theta_i)_{i\in I}$，将收益扰动为：

$$\tilde{u}_i(s,\theta) = u_i(s) + \epsilon\theta_i, \quad \theta_i \in [-1,1].$$

假设 $\theta_i \sim F_i$，相互独立，F_i 是具有连续可微密度的分布. 如此就形成了一个*扰动博弈*. 当扰动参数 $\epsilon \to 0$ 时候，扰动博弈的 BNE 趋于正则博弈的混合策略均衡，这正是下面的 *Harsanyi 纯化定理*.

定理 10.6 (Harsanyi 纯化定理) *给定玩家集 I 和行动空间 A. 对于一般的收益函数 u 和连续分布族 $\{F_i\}_{i\in I}$，对任意完全信息正则博弈 (I,A,u) 的混合策略 Nash 均衡 σ，存在一列扰动博弈纯策略 BNE s_ϵ，当扰动参数 $\epsilon \to 0$，$s_\epsilon \to \sigma$.*

混合策略均衡可以被看作不确定性趋于消失的时候的纯策略均衡. 这一定理的原始证明需要用到 Brouwer 不动点定理和隐函数定理，并且比较长，这里略去.

人们常说

> “Decision makers do not flip coins in the real world.”

然而，如果玩家对收益的信念有微小的不确定性的时候，他的行为就仿佛在抛硬币. 这是混合策略的似然解释（主观概率论）.

[lhy: 细化这一部分. 混合策略的进一步讨论

- 我们之前说过，Bayes 博弈对于玩家信念的刻画是相当受限制的.
  - 当引入不确定性、知识、信念的概念的时候，几乎不可避免需要加入限制条件.
- 另一方面，概率论的 Bayes 学派解释在哲学上也有很多争议.
  - 一旦使用 Bayes 学派的概率论研究不确定性、知识、信念，这一问题也是不可避免的.
- 因而，我们可以考虑完全理性、完全耐心玩家在无穷轮重复的完全信息博弈中的决策行为.
  - 玩家做出行动 a 的极限频率就是行动 a 在混合策略中的概率.
- 这一角度并不涉及不确定性、信念等数学上模糊的概念，单纯讨论混合均衡达到的方式.

]

第五部分

认知逻辑

第十一章　模态逻辑基础

人工智能的讨论不可避免要接触到很多人独有的哲学概念：认知、信念、知识、理解、情感、意识……我们需要有一套恰当的数学工具来表述这些哲学概念，从而算法化、自动化地模拟人. 过去，现在，乃至未来，最为成功的数学模型就是**模态逻辑**. 很多不精确的哲学讨论可以通过逻辑的方式形式化、数学化，最后算法化. 模态逻辑已经在计算机科学中起到了重要的作用（模型验证、形式化方法），它势必会在人工智能中也起到根基性的作用.

§11.1　模态逻辑的起源

§11.1.1　三段论

早在亚里士多德的时期，模态逻辑的概念就被提了出来. 回忆：亚里士多德的强三段论是有效的：

- 大前提：所有 A 都是 B.
- 小前提：所有 B 都是 C.
- 结论：因此，所有 A 都是 C.

人都会死，苏格拉底是人，所以苏格拉底会死.

三段论可以进行各种形式的扩展. 例如：

- 加入量词：任何对象，如果这个对象是人，那么它会死，苏格拉底这个对象是人，所以苏格拉底会死.
- 加入性质词：肯定的、否定的
- 加入模态词：无效、可能、必然、根据情况……

实际上亚里士多德也考虑过*模态三段论*. 亚里士多德认为如下模态三段论是有效的:

- 大前提: 所有 A 都必然是 B.
- 小前提: 所有 B 都是 C.
- 结论: 因此, 所有 A 都必然是 C.

然而, 他认为如下的模态三段论不是有效的:

- 所有 A 都是 B.
- 所有 B 都必然是 C.
- 因此, 所有 A 都必然是 C.

所有通班同学都是单身汉, 所有单身汉都必然是男性. 那么是否有: 所有通班同学都必然是男性? 实际上, 通过现代模态逻辑的表述可以证明, XLL 型三段论也是有效的. 这足以说明, 亚里士多德对于模态的理解还有很多缺陷, 或者反过来说, 模态三段论比经典的三段论更加复杂.

类似的例子是, 从物和从言, 考虑如下句子:

我觉得有人作弊.

这句话有两种解读方式. 从物的角度, 应该读作 $\exists x$（我觉得 : x 作弊）. 从言的角度, 应该读作我觉得（$\exists x : x$ 作弊）.

以上例子说明, 关于模态的逻辑, 并没有非常干净漂亮的、符合直观的定义, 所以模态三段论的讨论并没有流行起来.

§11.1.2 非经典逻辑

经典逻辑并不能够非常准确刻画我们对于"逻辑"的认识, 我们将给出以下几个例子.

回忆经典逻辑中的语义等值

$$p \to q \iff \neg p \vee q.$$

然而, 在哲学上, 这两者是不一样的含义. 考虑命题 p: $1+1>2$, q: 太阳从东边升起. "如果 $1+1>2$, 那么太阳从东边升起"是毫无道理的. 然而, "或者 $1+1 \not> 2$, 或者太阳从东边升起"是含义清晰的.

再看另一个例子, 考虑命题 p_n: π 的小数位包含连续的 n 个 1. $p_{100} \to p_{99}$ 是显然的, 然而 $\neg p_{100} \vee p_{99}$ 并不直观 !

以上的缺陷都源自我们对蕴含的理解过于简单粗暴. 上面的那种蕴含被称为**实质蕴含**，它最重要的特性是承认 $p \to q \iff \neg p \vee q$，特别地允许有 p 假但是 q 真.

为了解决上面的问题，C. I. Lewis 提出了**严格蕴含**的概念，其符号为 $p \dashv\!\models q$. 从语义上说，这个符号的意思是必然有当 p 是真的时候，q 是真的. 也可以说，不可能有 p 是真且 q 是假. 严格蕴含其实是对实质蕴含的一种改造，我们后面可以证明，p 严格蕴含 q 当且仅当必然有 p 实质蕴含 q.

实质蕴含还会导出还有很多不合乎常理的重言式. 比如 $p \to (q \to p)$ 或者 $(p \to q) \vee (q \to r)$.

另一种解决此问题的方式是从否定入手，这就是 Brouwer 的*直觉主义逻辑*，它不承认反证法. 因而否定和蕴含的含义发生了变化，例如 $\neg\neg p$ 不再等价于 p.

从本质上说，非经典逻辑都是尝试将*元语言*中的概念拿到*对象语言*中. 例如经典逻辑的元语言就是自然语言，而对象语言就是经典逻辑形式系统. 在经典逻辑中，必然、可能、过去、未来、知识、信念、可证明等概念都没有办法表示，因此模态逻辑的解决方案是：将这些元语言的概念拿到对象语言中，并进行形式化.

§11.2 模态语言

现在我们正式定义模态语言. 我们只考虑最简单的情况，没有量词，只有一个*模态算子*. *基本模态语言* L 可以按照如下定义递归生成：

- 命题字母 $p \in \mathbf{P}$ 属于 L，$\top$ 属于 L.
- 如果 ϕ 属于 L，那么 $\neg\phi$ 和 $\Box\phi$ 也属于 L.
- 如果 ϕ_1, ϕ_2 属于 L，那么 $(\phi_1 \wedge \phi_2)$ 也属于 L.

$\Box$：读作“Box”. 定义 L 更便捷的记号是使用 Backus-Naur 范式：

$$\phi \quad ::= \quad p \mid \top \mid \neg\phi \mid (\phi \wedge \phi) \mid \Box\phi.$$

类似命题逻辑，我们有如下缩写：

- $\phi \vee \psi \iff \neg(\neg\phi \wedge \neg\psi)$.
- $\phi \to \psi \iff \neg\phi \vee \psi$.
- $\bot \iff \neg\top$.

这些缩写意味着，我们对 Boole 连接词，依然保持经典逻辑的含义. 非经典性只体现在模态算子 $\Box$. 对偶模态算子 $\Diamond$ 定义为 $\neg\Box\neg$，读作“diamond”. 类比：$\exists = \neg\forall\neg$.

模态逻辑的哲学是多视角下看同一个数学概念. 下面是一些模态逻辑的例子，他们对于模态算子的解读都不一样：

- 基本模态逻辑：可能/必然是
- 时序逻辑：将会是
- 道义逻辑：被允许是
- 认知逻辑：被知道是
- 可证性逻辑：可以被证明是
- 动态逻辑：（在经过某些程序步骤之后）会是
- 联盟逻辑：被（她的父母）确保是
- 特征逻辑和描述逻辑：具有的属性是

下面我们看一些不同的逻辑下模态算子的解读：

例 11.1 (基础语义) 如果我们把模态算子按照基础语义来解读的话，我们可以把模态算子 $\Box$ 读成“必然”. $\Box\phi$ 读作“必然有 ϕ”. $\Diamond\phi$ 读作“不是必然有非 ϕ”，即可能有 ϕ. 因此，$\Diamond$ 读作“可能”. 反之，$\Box\phi$ 也可以读作“不可能有非 ϕ”，即必然有 ϕ. 因此 $\Diamond$ 和 $\Box$ 确实是对偶的. 在这样的语义下，我们还有这些例子：

- $\Box p \to \Diamond p$：必然的是可能的.
- $p \to \Box p$：真的是必然的.
- $\Diamond p \to \Box\Diamond p$：可能的是必然可能的. $\Box$

例 11.2 (认知语义) 如果把模态算子按照认知逻辑来解读解读，我们可以把模态算子 $\Box$ 读成“知道”，并写成 K. 于是，K 表示某个特定的个体对世界的认知. 有如下例子：

- $K\phi$（即 $\Box\phi$）表示我知道 ϕ.
- $K\phi \to \phi$ 表示如果我知道 ϕ，那么 ϕ 是真的.

- $\phi \to K\phi$ 表示如果 ϕ 是真的，那么我知道 ϕ.
- 最后，$\neg K\phi$ 与 $K(\neg\phi)$ 的含义是不同的，比如 ϕ 表示“上帝存在”，那么前者是“我不知道上帝存在”，而后者是“我知道上帝不存在”，明显后者的判断要更强一些. □

例 11.3 (可证性语义) 如果把模态算子按照可证性逻辑解读，我们可以把模态算子 $\Box$ 读成“可证明”. 例如，$\Box\phi$ 读作 ϕ 是可证明的. 考虑 Peano 算术系统 **PA**，即一阶逻辑加上 Peano 公理. 符号 $\mathbf{PA} \vdash \phi$ 表示 ϕ 可以由 **PA** 演绎出，即 ϕ 可以被证明. 算术公理系统一个重要的定理叫 *Löb 定理*：如果 $\mathbf{PA} \vdash \mathsf{Prov}(\ulcorner\phi\urcorner) \to \phi$，那么 $\mathbf{PA} \vdash \phi$. 用自然语言来读，如果可以证明“如果 ϕ 是可证明的，那么 ϕ 是真的”，那么就可以证明 ϕ. 因此，在可证逻辑中，它对应 *Löb 公式*：$\Box(\Box\phi \to \phi) \to \Box\phi$. □

一般地，我们可以考虑多个模态算子、一个模态算子涉及多个公式的情形. *模态语言类型*是一个元组 (O, ρ)，其中 O 是一个模态算子 ∇ 的非空集合，$\rho : O \to \mathbb{N}$ 表示每一个模态算子的元数. *多元模态语言*的 BNF 为：

$$\phi \quad ::= \quad p \mid \top \mid \neg\phi \mid (\phi \wedge \phi) \mid \nabla(\underbrace{\phi, \ldots, \phi}_{\rho(\nabla)}),$$

其中 $p \in \mathbf{P}$，$\nabla \in O$.

类似地，定义对偶模态算子 $\triangle(\phi_1, \ldots, \phi_k)$ 为 $\neg\nabla(\neg\phi_1, \ldots, \neg\phi_k)$.

例 11.4 (时序逻辑) 基础时序逻辑有两个一元模态算子：G 和 H. $G\phi$ 表示未来总会有 ϕ（always *G*oing to be）. $H\phi$ 表示过去总有 ϕ（always *H*as been）.

他们的对偶算子是：F 和 P. $F\phi$ 表示在未来某个时刻会有 ϕ（be true at some *F*uture time）. $P\phi$ 表示在过去某个时刻有 ϕ（was true at some *P*ast time）.

还可以加入一个“直到”（*U*ntil）算子 $U(\phi, \psi)$，它表示直到 ϕ 发生都有 ψ.

下面是一些时序逻辑的例子：

- $P\phi \to GP\phi$：如果过去发生过 ϕ，那么 ϕ 在未来总会发生过.
- $F\phi \to FF\phi$：如果未来某个时刻会有 ϕ，那么在未来的某个时刻会发生：未来的某个时刻会有 ϕ.
- *McKinsey 公式* $GFp \to FGp$：如果原子的信息总会在某个未来时刻为真，那么他会在未来某个时刻之后变得总为真. □

例 11.5 (认知逻辑) 基本模态算子为 K_a 和 B_a，K_a 表示个体 a 知道，B_a 表示个体 a 相信. 例如 $K_aK_b\phi \leftrightarrow K_bK_a\phi$ 表示我知道你知道 ϕ 当且仅当你知道我知道 ϕ.

此外，我们也可以加入共同知识算子 C，$C\phi$ 当且仅当 $K_a(\phi \wedge C\phi)$ 对任意 a 成立.

我们也可以加入二元的相对算子. 如相对共同知识 $C^r(\phi,\psi)$，表示当所有人都知道 ψ 时，所有人具有共同知识 ϕ. 以及条件信念 $B_a(\phi,\psi)$，表示当 ψ 为真时，个体 a 相信 ϕ.□

例 11.6 (命题动态逻辑) 命题动态逻（PDL）辑有无穷多个模态算子，记为 $[\pi]$，其中 π 按照程序来理解. $[\pi]\phi$ 解释为：从当前状态开始运行程序 π，任何一种终止状态，ϕ 都成立. 它的对偶算子记为 $\langle\pi\rangle$，$\langle\pi\rangle\phi$ 解释为：从当前状态开始运行程序 π，存在一种终止状态，ϕ 成立.

PDL 的重要区别在于我们可以用模态算子来构造新的模态算子. 假设基本程序为 $a,b,\ldots$，我们可以用三种操作构造新的程序（模态算子）：

- 选择：如果 π_1,π_2 是程序，那么 $\pi_1 \cup \pi_2$ 也是程序，它（非确定性地）执行 π_1 或 π_2. 模态算子为 $[\pi_1 \cup \pi_2]$ 和 $\langle\pi_1 \cup \pi_2\rangle$.
- 复合：如果 π_1,π_2 是程序，那么 $\pi_1;\pi_2$ 也是程序，它先执行 π_1 再执行 π_2. 模态算子为 $[\pi_1;\pi_2]$ 和 $\langle\pi_1;\pi_2\rangle$.
- 迭代：如果 π 是程序，那么 π^* 也是程序，它执行 π 有限次（可能是零次）. 模态算子为 $[\pi^*]$ 和 $\langle\pi^*\rangle$.

以上构造得到的 PDL 被称为**正则 PDL**. 我们还可以引入交 $\pi_1 \cap \pi_2$，表示并行计算；也可以引入条件程序 $\phi?$，其中 ϕ 是公式.

下面是一些命题动态逻辑的例子：

- $\langle\pi^*\rangle\phi \leftrightarrow \phi \vee \langle\pi;\pi^*\rangle\phi$. 在执行 π 有限次数后到达一个带有信息 ϕ 的状态当且仅当要么我们已经在当前状态中拥有信息 ϕ，要么我们可以执行一次 π，然后在有限次数的 π 迭代后找到一个带有信息 ϕ 的状态.
- Segerberg 公理（归纳公理）：$[\pi^*](\phi \to [\pi]\phi) \to (\phi \to [\pi^*]\phi)$. 这个公式的含义是什么?
- 用模态算子表示 `if` ϕ `then` a `else` b：$(\phi?;a) \cup (\neg\phi?;b)$. □

§11.3 Kripke 语义与框架语义

从模型论的角度来说，一个逻辑框架是一个三元组：(语言，模型，语义) $(\mathbf{L}, C, \vDash)$. 例如在命题逻辑中，这三元组分别是：

- 语言：命题公式的集合 $\{\top, \bot, p, p \vee q, \dots\}$.
- 模型：常值和命题字母的真假：$\top : \top$，$p : \top$，$q : \bot$，等等.
- 语义：Boole 函数的真值表递归定义.

对于基本模态逻辑，我们有如下要素：

- 语言：基本模态语言 $\mathbf{ML}(\mathbf{P}, \Box)$.
- 模型：Kripke 模型.
- 语义：Kripke 语义.

一个 *Kripke 模型*（关系模型）可以看作是一个带有标记的有向边和节点的图，节点表示可能的世界，状态或对象等，用命题字母标记；边表示节点之间的关系，用模态算子标记. 一个*框架*是一个没有节点标记的模型.

在数学上，Kripke 模型是唯一的定义，然而在哲学上，我们可以对这一数学结构做不同的解读.

在*可能世界语义*（或 *Kripke 语义*）中，我们将节点解读为*可能世界*. 此时 $\Box$ 被理解为“必然”，$\Diamond$ 被理解为“可能”. $\Box\phi$ 在当前世界为真当且仅当 ϕ 在当前世界的所有可能的替代世界上为真. 用形式化的表述就是，$\Box\phi$ 在世界 w 上成立当且仅当 ϕ 在 w 的所有后继上为真. 在这种语义中，一个世界的意义取决于它与其他世界的联系.

在*状态语义*中，我们将节点解读为*状态*. 于是边就被解读为状态的转移. $\Box\phi$ 在当前状态为真当且仅当 ϕ 在所有可能转移到的状态上为真. PDL 可以用以上语义来理解. 在哲学中，状态往往是不完全可观测的，此时模态逻辑可以被理解为不完全信息中可以确定的性质.

在*对象语义*中，我们将节点解读为*对象*. w 有边指向 v 意味着 w 是 v 包含的一个整体，v 是 w 的一个部分. 在哲学上，模态逻辑可以讨论整体论与还原论. $\Box\phi$ 对一个对象为真当且仅当 ϕ 在它的所有部分都为真.

在基本情形下，Kripke 模型的正式定义如下：

定义 11.1 (Kripke 框架，模型，点模型，二元情形) 一个**Kripke 框架**是元组 $\mathcal{F} = (W, R)$，其中

- W 是非空集合（可能世界集）；
- $R \subseteq W \times W$ 是一个 W 上的二元关系（边）.

一个 **Kripke 模型** $\mathcal{M}$ 是一个元组 $(\mathcal{F}, V)$，其中 $\mathcal{F}$ 是 Kripke 框架，$V : \mathbf{P} \to 2^W$ 是赋值函数.

一个 **Kripke 点模型** $(\mathcal{M}, w)$ 是一个 Kripke 模型 $\mathcal{M}$ 加上一个指定的点 $w \in W$.

一个典型的 Kripke 模型如图 11.1所示.

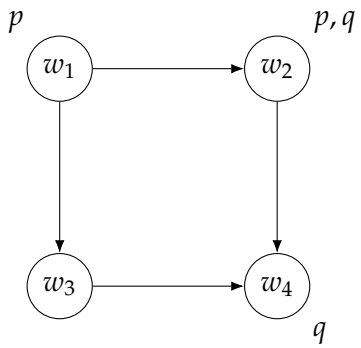


图 11.1: Kripke 模型的例子

对于多元情形，我们有如下定义：

定义 11.2 (Kripke 框架，模型，点模型：一般情形) 考虑 $\mathbf{ML}(\mathbf{P}, (O, \rho))$，一个 **Kripke 框架**指的是元组 $\mathcal{F} = (W, \{R_\nabla : \nabla \in O\})$，其中 W 是非空集合（可能世界集），R_∇ 是一个 W 上的 $\rho(\nabla) + 1$ 元关系.

一个 **Kripke 模型** $\mathcal{M}$ 指的是元组 $(\mathcal{F}, V)$，其中 $\mathcal{F}$ 是框架，$V : \mathbf{P} \to 2^W$ 是赋值函数.

一个 **Kripke 点模型** $(\mathcal{M}, w)$ 是 Kripke 模型 $\mathcal{M}$ 加上一个指定的点 $w \in W$.

下面我们再给出 Kripke 语义的形式化定义.

定义 11.3 (Kripke 语义：基本情形) 考虑 $\mathbf{ML}(\mathbf{P}, \Box)$. 符号 $\mathcal{M}, w \vDash \phi$ 表示 ϕ 在点模型 $\mathcal{M}, w$ 是可满足的. 这一个概念可以递归定义如下

- $\mathcal{M}, w \vDash \top \iff$ 总是.
- $\mathcal{M}, w \vDash p \iff p \in V(w)$.
- $\mathcal{M}, w \vDash (\phi \wedge \psi) \iff \mathcal{M}, w \vDash \phi$ 且 $\mathcal{M}, w \vDash \phi$.

- $\mathcal{M}, w \vDash \neg\phi \iff \mathcal{M}, w \nvDash \phi$.
- $\mathcal{M}, w \vDash \Box\phi \iff$ 对所有 v，如果 wRv，那么 $\mathcal{M}, v \vDash \phi$.

因此，$\mathcal{M}, w \vDash \Diamond\phi \iff$ 存在 v 满足 wRv 使得 $\mathcal{M}, v \vDash \phi$.

思考：在图 11.1中，有对哪些 i 来说，成立 $\mathcal{M}, w_i \vDash \Box(p \to \Diamond q)$?

定义 11.4 (Kripke 语义：一般情形) 考虑 $\mathbf{ML}(\mathbf{P}, (O, \rho))$. 符号 $\mathcal{M}, w \vDash \phi$ 表示 ϕ 在点模型 $\mathcal{M}, w$ 是可满足的. 这一个概念可以递归定义如下

- $\mathcal{M}, w \vDash \top \iff$ 总是.
- $\mathcal{M}, w \vDash p \iff p \in V(w)$.
- $\mathcal{M}, w \vDash (\phi \wedge \psi) \iff \mathcal{M}, w \vDash \phi$ 且 $\mathcal{M}, w \vDash \psi$.
- $\mathcal{M}, w \vDash \neg\phi \iff \mathcal{M}, w \nvDash \phi$.
- $\mathcal{M}, w \vDash \nabla(\phi_1, \ldots, \phi_{\rho(\nabla)}) \iff$ 对任意 $w_1, w_2, \ldots w_{\rho(\nabla)}$，如果 $R(w, w_1, \ldots, w_{\rho(\nabla)})$，那么存在 w_i 使得 $\mathcal{M}, w_i \vDash \phi_1$.

思考：为什么要这么定义 ∇ 的语义?

如果一个模态算子对应的关系是二元关系，我们就称这个模态算子是一元的. 此时，关系 wRv 可以记为 $w \to_a v$. 模态算子一般写作 $\Box_a$.

> **注. (模型验证)** 我们考虑如下两个**模型验证**问题：局部模型验证，即测试 $\mathcal{M}, w \vDash \varphi$ 是否成立；全局模型验证，即计算集合 $\{w \in W_{\mathcal{M}} : \mathcal{M}, w \vDash \varphi\}$.
>
> 设 $l_R(X) = \{w \in W_{\mathcal{M}} : \forall v : w \to_{\mathcal{M}} v \implies v \in X\}$，我们可以递归定义 $\mathcal{M}$ 中公式的扩张：
>
> $$\begin{aligned} [\![\top]\!]^{\mathcal{M}} &= W_{\mathcal{M}}, & [\![p]\!]^{\mathcal{M}} &= \{w : p \in V(w)\}, \\ [\![\neg\varphi]\!]^{\mathcal{M}} &= W_{\mathcal{M}} \setminus [\![\varphi]\!]^{\mathcal{M}}, & [\![(\varphi \wedge \psi)]\!]^{\mathcal{M}} &= [\![\varphi]\!]^{\mathcal{M}} \cap [\![\psi]\!]^{\mathcal{M}}, \\ [\![\Box\varphi]\!]^{\mathcal{M}} &= l_R\left([\![\varphi]\!]^{\mathcal{M}}\right). \end{aligned}$$
>
> 全局模型验证的有一个很容易想到的算法：按照公式的复杂程度，用 φ 的子公式标记 $\mathcal{M}$ 中每个状态的真值. 然而，这个问题在实践中并不平凡，因为状态的数量可能是指数多的！

模态公式的（语义）真值可以从两个维度来讨论：全局还是局部，模型还是框架. 我们有如下四种语义真值的定义：

- ϕ 在点模型 $\mathcal{M}, w$ 可满足指的是 $\mathcal{M}, w \vDash \phi$.

- ϕ 在模型 $\mathcal{M}$ 有效，记为 $\mathcal{M} \vDash \phi$ 指的是 $\mathcal{M}, w \vDash \phi$ 对所有 w 成立.
- ϕ 在点框架 $\mathcal{F}, w$ 有效，记为 $\mathcal{F}, w \vDash \phi$ 指的是 $\mathcal{M}, w \vDash \phi$ 对所有基于点框架 $\mathcal{F}, w$ 的点模型 $\mathcal{M}, w$ 上可满足.
- ϕ 在框架 $\mathcal{F}$ 有效，记为 $\mathcal{F} \vDash \phi$ 指的是 $\mathcal{M} \vDash \phi$ 对所有基于框架 $\mathcal{F}$ 的模型 $\mathcal{M}$ 上有效.
- ϕ 对框架类 K 有效，记为 $\vDash_K \phi$ 指的是 $\mathcal{F} \vDash \phi$ 对所有 $\mathcal{F} \in K$ 成立.

模态逻辑的真值总结为表 11.1，我们主要关心高亮的两个部分.

	模型	框架
局部	$\mathcal{M}, w \vDash \phi$	$\mathcal{F}, w \vDash \phi$
全局	$\mathcal{M} \vDash \phi$	$\mathcal{F} \vDash \phi$

表 11.1: 模态逻辑的真值

我们来看一个框架语义的例子. 如图 11.2 所示，是否成立 $\mathcal{F} \vDash \Box(p \to \Diamond p)$?

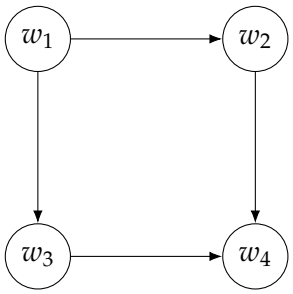


图 11.2: 框架语义的例子

例 11.7 (基本模态逻辑) 考虑基本模态逻辑，因此他只有模态算子 $\Box$ 和 $\Diamond$，分别表示必然和可能. Kripke 模型的点应该被解读为可能世界. 我们可以将对于可能和必然的理解写成模态公式. 如果一个东西是真的，那么他也是可能的：$\phi : p \to \Diamond p$.

如果一个东西是真的，那么他也是可能的：$\phi : p \to \Diamond p$. 我们可以将对于可能和必然的理解反映到 Kripke 模型中. 真实世界是一个可能的世界：xRx，这是一个自反关系. 对于自反点模型以及框架，$\mathcal{M}, v \vDash \phi$ 以及 $\mathcal{F} \vDash \phi$. □

例 11.8 (时序逻辑) 考虑基本的时序逻辑，因此他只有模态算子 G 和 H，以及对偶 F 和 P，他们分别对应未来和过去. Kripke 模型的点应该被解读为时刻，时刻之间有两个关系：$t_1 R_F t_2$ 表示时刻 t_2 是时刻 t_1 的未来，$t_1 R_P t_2$ 表示时刻 t_2 是时刻 t_1 的过去. 我们对时间的理解将会反映在 Kripke 模型上.

关于时间的的一个自然的假设是过去是未来的倒转：对任意时刻 t_1, t_2，$t_1 R_F t_2 \iff t_2 R_P t_1$. 如果我们承认时间具有这样的性质，那么 R_F 和 R_P 实际上就是箭头倒转一下. 记 $R_F = R$，我们有：

$$\mathcal{M}, w \vDash F\phi \iff \exists v(wRv \wedge \mathcal{M}, v \vDash \phi).$$

$$\mathcal{M}, w \vDash P\phi \iff \exists v(vRw \wedge \mathcal{M}, v \vDash \phi).$$

进一步假设时间是线性的，也就是关系 R 是一个严格全序：

- 反自反：$\forall x \neg xRx$.
- 传递：$\forall x, y, z(xRy \wedge yRz \to xRz)$.
- 完全：$\forall x, y(xRy \vee yRx \vee x = y)$.

设 $\mathcal{F}$ 是时间框架，是否有：$\mathcal{F} \vDash Pp \to GPp$ 以及 $\mathcal{F} \vDash Fp \to HFp$? □

§11.4 模态可定义性

逻辑的意义在于把对事物的抽象认知用形式化的语言表述出来. 我们已经看到，我们对事物的认知可以被两种方式描述出来：Kripke 模型（框架）的特殊结构，或者具体的模态公式. 本节探讨这两种方式之间的联系.

我们先看几个简单的例子：

例 11.9

- $\mathcal{M}, w \vDash \Diamond\top$.

  存在一个 v，$w \to v$ 并且 $\mathcal{M}, v \vDash \top$，也就是 w 有一个后继.

- $\mathcal{F} \vDash \Diamond\top$.

  每个基于 $\mathcal{F}$ 的点模型 $\mathcal{M}, v$ 都有 $\Diamond\top$，即 $\mathcal{F}$ 每个点都有后继.

- $\mathcal{F} \vDash p \to \Diamond p$.

  任意赋值 V 和任意点 w，都有 $\mathcal{M}, w \vDash p \to \Diamond p$. 因此，如果 w 上有 p，那么 w 必须有一个后继上面也有 p. 取 V 使得只有 w 上有 p，因为对任意赋值都要成立，所以在这个赋值下，w 必须要以自己为后继. 因此 $\mathcal{F}$ 充分必要地是一个自反框架. □

以上例子启发我们，模态公式可以定义 Kripke 模型的特殊结构，特殊的 Kripke 模型划定了具体的模态公式，这种联系可以被形式化为**模态可定义性**.

从点模型的角度，我们可以讨论模态公式定义了什么样的点模型.

定义 11.5 (点模型可定义性) 设 K 是一些点模型的集合，Σ 是一些模态公式的集合. 我们说 K **可由公式集 Σ 定义**，指的是对任意点模型 $\mathcal{M}, w$，$\mathcal{M}, w \in K$ 当且仅当任何 Σ 中的公式在 $\mathcal{M}, w$ 都是可满足的. 如果 $\Sigma = \phi$，我们就说 K **可以由公式 ϕ 定义**.

对于框架可定义性，我们有类似的定义.

模态可定义性：如果定义 K 的公式集 Σ 有限，那么 K 也可以由单个公式 $\bigwedge_{\phi\in\Sigma}\phi$ 定义. 如果 K 由公式 ϕ 定义，那么它的补 $\overline{K}$ 就可以由 $\neg\phi$ 定义. 然而，如果 K 由无穷个公式定义，它的补 $\overline{K}$ 不一定可以用无穷个公式定义. 这是因为形式上来说，$\overline{K}$ 可以被 $\bigvee_{\phi\in\Sigma}\neg\phi$ 定义，然而这是一个无穷析取，不一定能等价于某一个集合的公式.

我们来看框架类可定义性的更多例子：

例 11.10

- $\Box p \to \Diamond p$.

  定义了每一个点都有后继的框架，与 $\Diamond\top$ 定义了一样的框架类.

- $\Box p \to \Box\Box p$.

  定义了传递的框架类.

- $\Diamond p \to \Diamond\Diamond p$.

  定义了稠密的框架类，即如果 $x \to y$，那么存在 z 满足 $x \to z$ 且 $z \to y$. □

注意，如果将这些模态算子放在时序逻辑中理解，我们实际上已经得到了关于时间的公理！

注. 我们注意到，所有以上的例子，模型的结构都是可以用一阶公式描述的.

- 每个点都有后继：$\forall x \exists y(xRy)$.
- 传递：$\forall x, y, z(xRy \wedge yRz \to xRz)$.
- 稠密：$\forall x, y(xRy \to \exists z(xRz \wedge zRy))$.

将一阶公式中的变元 $x, y, \ldots$ 看成模型的点，类似模态公式，我们可以讨论一阶公式可定义的模型类/框架类.

更一般地，我们可以问，给定一个点模型类 K，是否存在模态公式（集）可以定义 K？类似地，给定一个框架类 K，是否存在模态公式（集）可以定义 K？对于点模型来说，可以被模态公式集定义以及可以被模态公式定义，都有充分必要的刻画定理. 对于框架来说，如

果限制框架是一阶可定义的框架，我们有 GoldBlatt-Thomason 定理，这是一个充分必要条件.

第十二章　认知逻辑与共同知识

§12.1　“泥泞的孩童”谜题

有 n 个孩子在玩泥巴，他们互相泼泥巴. 母亲告诉孩子们，如果他们脸上沾上了泥巴，会受到严厉的惩罚. 孩子们不能看到自己的脸，但是可以看到其他所有人的脸. 所有孩子都希望保持自己的脸干净，但是弄脏别人的脸. 此时，孩子的父亲出现了，于是，孩子们停止泼泥巴. 孩子们互相不说话. 父亲看到了 k（$k \geq 1$）个人脸上有泥巴，于是宣布：“你们至少有一个人脸上沾了泥巴.”之后，父亲会公开地问若干轮如下问题：“你们知道自己脸上有泥巴了吗？”孩子们回答“知道”或者“不知道”. 假设孩子们观察力敏锐、聪慧且诚实，并且每一轮他们都同时回答. 接下来会发生什么？

假设有 k 个孩子脸上有泥巴. 谜底：在前 $k-1$ 轮中，所有孩子都会说“不知道”，在第 k 轮中，所有脸上有泥巴的孩子都会说“知道”. 这一结论的论证来源于对 k 的归纳.

当 $k=1$ 时，脸上沾满泥巴的孩子看到其他人都没有泥巴. 既然他知道至少有一个孩子的脸上有泥巴，他就能推出那个人肯定是他自己.

现在假设 $k=2$，脸上沾满泥巴的孩子是 a 和 b. 一开始，因为他们分别看到了对方的脸上有泥巴，所以他们每个人都回答“不知道”. 但是，当 b 回答“不知道”时，a 意识到他自己肯定是脸上有泥巴的那个孩子，否则 b 就会在第一轮中知道泥巴在他的脸上，并回答“知道”. 因此，a 在第二轮回答“知道”. b 也会通过同样的推理得出相同的结论.

现在假设 $k=3$，脸上沾满泥巴的孩子分别是 a，b 和 c. 孩子 a 的论证如下. 假设我没有泥巴落在脸上. 根据 $k=2$ 的情况，b 和 c 在第二轮都会回答“是”. 他们没有这样做，我意识到假设是错误的，我的脸上也有泥巴. 因此在第三轮我会回答“知道”. b 和 c 的论证也是类似的.

$k=3$ 的论证具有一般性，对一般的 k 也成立.

> **注.** “泥泞的孩童”还有其他流行的陈述方式，比如“蓝眼睛红眼睛”. 一个岛上有 100 个人，其中有 5 个红眼睛，95 个蓝眼睛. 这个岛有三个奇怪的宗教规则.

1. 他们不能照镜子，不能看自己眼睛的颜色.

2. 他们不能告诉别人对方的眼睛是什么颜色.

3. 一旦有人知道了自己的眼睛是红色，他就必须在当天夜里自杀.

岛民不知道具体有几个红眼睛.

某天，有个旅行者到了这个岛上. 由于不知道这里的规矩，所以他在和全岛人一起狂欢的时候，一不留神说了一句话:“你们这里有红眼睛的人.”假设这个岛上的人足够聪明，每个人都可以做出缜密的逻辑推理. 请问这个岛上将会发生什么?

那么，为什么会这样呢? 如果 $k > 1$，那么所有人都知道 p:“至少有一个人脸上有泥巴”. 那么父亲说这句话的意义是什么? 如果父亲没有说 p，那么会发生什么? 无论父亲问多少轮，所有孩子都只会回答“不知道”!（为什么）因此，父亲公开说了 p，这是谜题的关键.

假设 $k = 2$，脸上沾满泥巴的孩子是 a 和 b. 在父亲宣布 p 之前，a 和 b 都知道 p. 然而，他们并不知道对方知道 p. a 可能会有两种想法:

- 我的脸上有泥巴，所以 b 知道 p.
- 我的脸上没有泥巴，b 是唯一一个有泥巴的，所以 b 不知道 p.

当父亲宣布 p 之后，a 知道了 b 知道 p. 当第一轮 b 回答“不知道”之后，a 可以用“b 知道 p”这一知识推出自己脸上有泥巴.

假设 $k = 3$，脸上沾满泥巴的孩子是 a，b 和 c. 在父亲宣布 p 之前，a，b 和 c 不仅知道 p，而且知道彼此知道 p. 以 a 的视角看，b 能看到 c 脸上有泥巴，所以 a 知道 b 知道 p. 但是，a，b，c 都不知道所有人知道所有人知道 p!

用 $E^m p$ 表示所有人知道所有人知道……所有人知道（m 次）p. 在一般情况下，父亲没有宣布 p 之前，$E^k p$ 并不成立. 父亲宣布了 p 之后，对任意 $m \geq 1$，$E^m p$ 都成立! 因此，父亲宣布 p 带来了*共同知识*. 有了共同知识，这一谜题就可以按照我们所讨论的方式进行下去.

我们曾经假设过所有人“观察力敏锐、聪慧且诚实”. 然而，这一假设并不足够. 我们必须假设所有人都知道所有人“观察力敏锐、聪慧且诚实”，所有人都知道所有人都知道所有人“观察力敏锐、聪慧且诚实”，……换言之，我们需要假设“所有人观察力敏锐、聪慧且诚实”是共同知识. 假设还是只有两个孩子 a, b 脸上有泥巴. 假如 a 不知道 b 是诚实的，即便 b 回答了“不知道”，a 也无法从 b 的回答中得到任何额外的知识!

除了假设“所有人观察力敏锐、聪慧且诚实”是共同知识，我们还需要假设以下陈述是共同知识:

- 每个人都能看到所有除自己外的人.
- 每个人都听到了父亲说的话.
- 父亲是诚实的.
- 每个人都在每一轮进行了充分的推理.
- ……

任何假设的破坏都会导致之前的讨论失效. 那么，为什么父亲宣布 p 就可以让 p 变成共同知识呢?

所有人都听到父亲说 p 并不能产生共同知识. 假如父亲只是对每一个孩子单独宣布 p. 所有人并不知道所有人都知道 p，因而仅仅可以做到 Ep. 那么，所有人都知道所有人听到父亲说 p 会如何呢? 进一步假设每个孩子给每一个孩子都安装了窃听器，每个人都能够偷听每个人与父亲的谈话内容. 所有人并不知道所有人都知道所有人都知道 p，因而仅仅有 E^2p. 因此，父亲宣布 p 会产生共同知识的核心原因是公开宣布，此时对每一个 m 都有 E^mp.

“泥泞的孩童”谜题足以表明，关于“知道”的讨论远比想象的复杂. 关于“知道”和知识的研究在哲学中划归为知识论. 接下来，我们将使用模态逻辑来形式化关于“知道”和知识的讨论，这被称之为认知逻辑.

§12.2 认知逻辑的基本模型与性质

假设有 n 个人，分别叫 $1,2,\ldots,n$. 基本命题集为 $\mathbf{P}$，用字母 $p,q,r,\ldots$ 表示基本命题，例如，p 表示“孩子 1 的脸上有泥巴”. 回忆：逻辑框架是一个三元组（语言，模型，语义）. 命题认知逻辑的的三元组是:

- 语言 L_n：命题逻辑加上模态算子 $K_i, i=1,\ldots,n$.
- 模型 $\mathcal{M},w$：Kripke 模型
- 语义 $\vDash$：可能世界语义

模态公式 $K_i\phi$ 被读作“i 知道 ϕ”. 从语义来说，K_i 是 $\Box$ 算子，即我知道 ϕ 意味着在我认为的所有可能世界中 ϕ 都是真的，因此，$\mathcal{M},w\vDash K_i\phi$ 当且仅当对任意 v，如果 $w\to_i v$，那么 $\mathcal{M},v\vDash\phi$.

模态公式的真值有两个层面，一个是在点模型上可满足：$\mathcal{M}, w \vDash \phi$，另一个是在框架上有效：$\mathcal{F} \vDash \phi$.

虽然我们没有定义 K_i 的对偶算子，但是 K_i 的对偶相当于 $\Diamond$ 算子. $\neg K_i \neg \phi$ 表示的意思是“i 不知道 ϕ 不是真的”，因此 i 会考虑 ϕ 可能是真的. 当然，这也意味着 i 会考虑 $\neg\phi$ 也可能是真的. 例如考虑“我不知道上帝存在”和“我知道上帝不存在”，他们的模态公式分别是 $\neg Kp$ 和 $K\neg p$. 显然，前者是更弱的一种表述，因此 $\neg K$ 和 $K\neg$ 的含义完全不同.

例 12.1

- $K_1 K_2 p \wedge \neg K_2 K_1 K_2 p$.

  1 知道 2 知道 p，但是 2 并不知道 1 知道 2 知道 p.

- $\neg K_i p \to K_i(\neg K_i p)$.

  如果我不知道 p，那么我知道我不知道 p.

- $K_i(p \wedge \neg K_i p)$.

  我知道如下的陈述：p 是真的，且我不知道 p. 一种类似的写法是，$K_i p \wedge K_i \neg K_i p$.
  我知道 p，但是我又知道我不知道 p. □

模态算子 K_i 有特殊的性质，这要求我们对 K_i 对应的关系 R_i 也有额外的要求. 我们要求每一个 R_i 都是等价关系 $\sim_i$：

- 自反：$\forall x\, x \sim_i x$.
- 传递：$\forall x, y, z (x \sim_i y \wedge y \sim_i z) \to x \sim_i z$.
- 对称：$\forall x, y (x \sim_i y \leftrightarrow y \sim_i x)$.

从可能世界的角度来说，这一要求就是说对 i 来说，她所认为可能的世界之间都是不可区分的.

从模态可定义性的角度来说，R_i 的特殊性质会对应 K_i 特殊的公式. 这些公式就可以被看成关于“知道”的公理（模式）或推导规则. 承认某一条公理（模式）或推导规则就必须承认可能世界具有某一种性质，反之亦然.

公理 12.1 (分配公理) $\vDash (K_i(\phi \to \psi) \wedge K_i \phi) \to K_i \psi$.

有效性验证如下：假设 $\mathcal{M}, w \vDash K_i(\phi \to \psi)$ 且 $\mathcal{M}, w \vDash K_i \phi$. 于是，对所有 R_i 后继 v 都有 $\mathcal{M}, v \vDash \phi \to \psi$ 和 $\mathcal{M}, v \vDash \phi$，因而 $\mathcal{M}, v \vDash \psi$. 根据定义，$\mathcal{M}, w \vDash K_i \psi$，因而对所有 $\mathcal{F}$，分配公理有效.

分配公理类比演绎推理的肯定前件（MP）推导规则. 分配公理意味着拥有知识的个体可以对自己的知识做任意的演绎推理，因而假设个体是逻辑全知的.

规则 12.1 (知识泛化规则) *对所有 $\mathcal{F}$，如果 $\mathcal{F} \vDash \phi$，那么 $\mathcal{F} \vDash K_i\phi$.*

有效性验证如下：假设 $\mathcal{F} \vDash \phi$，这意味着对所有基于 $\mathcal{F}$ 的点模型都有 $\mathcal{M}, w \vDash \phi$. 因此，对任意 w 的 R_i 后继 v，也有 $\mathcal{M}, v \vDash \phi$. 所以也有 $\mathcal{M}, w \vDash K_i\phi$ 成立，因而 $\mathcal{F} \vDash K_i\phi$.

知识泛化规则类比一阶逻辑推理的泛化规则. 前提成立的 ϕ 是关于 $\mathcal{F}$ 本身的性质（特别是关于知识），因此知识泛化规则意味着个体知道关于知识的一切性质. 其实更重要的是，知识的一切性质都是共同知识.

公理 12.2 (知识公理或真理公理) $\vDash K_i\phi \to \phi$.

验证留作练习. 知识公理意味着，i 知道的命题一定是真的. 在知识论中，这一要求实际上反映了“拥有知识”需要付出努力、值得一定的奖励. 与此相对应地，信念则是更加主观、随意的，因而并不具有真理性. 为了理解这一点，对比以下两句话：我考试挂了，但不知道我考试挂了；我考试挂了，但我不相信我考试挂了.

公理 12.3 (正内省公理) $\vDash K_i\phi \to K_iK_i\phi$.

公理 12.4 (负内省公理) $\vDash \neg K_i\phi \to K_i\neg K_i\phi$.

验证留作练习. 这两条公理意味着个体会通过内省来知道自己的处境，特别是“我知道什么”和“我不知道什么”. “知之为知之，不知为不知”. 这里留一个思考：（负）内省公理是否合理?

以上五条性质（四条公理 + 一条推导规则）加上 MP 形成的推理系统称为 *S5 公理系统*. 需要注意的是，这些公理其实都是公理模式，包含了无穷条公理. 此外，从哲学的角度讨论，还有一些别的公理，例如

公理 12.5 (一致性公理) $\vDash_H \neg K_i\bot$.

这一公理表明个体不能够知道假的陈述，以此区别于信念.

我们基于框架类 H 给出了关于知识的公理. 反过来，公理对应什么样的框架结构呢? 我们总结在表 12.1中.

这里，欧氏性的定义如下：

$$\forall x, y, z(xR_iy \wedge xR_iz \to yR_iz).$$

直观上说，欧氏性意味着关系一定形成三角形.

序列性定义如下：

$$\forall x \exists y\, xR_iy.$$

公理	R_i 的性质
$K_i\varphi \to \varphi$	自反性
$K_i\varphi \to K_iK_i\varphi$	传递性
$\neg K_i\varphi \to K_i\neg K_i\varphi$	欧氏性
$\neg K_i\bot$	序列性
$\varphi \to K_i\neg K_i\neg\varphi$	对称性

表 12.1: 知识公理对应的模型结构

换言之，所有点都有后继. 这里留两个思考. 从可能世界角度，R_i 的这些性质有什么直观的含义？为什么有些公理没有对应的结构性质？（提示：注意观察一个公理/规则是否有 H 出现）

可以看出来，以上关系其实并不是孤立的，我们有：

引理 12.1

- 如果 R_i 是自反和欧氏的，那么 R_i 是对称和传递的.
- 如果 R_i 是对称和传递的，那么 R_i 是欧氏的.
- 以下命题等价：
  - R_i 是自反、对称和传递的.
  - R_i 是对称、传递和序列的.
  - R_i 是自反和欧氏的.

证明留作练习.

下面我们将认知逻辑语言加入共同知识算子和它的语义. 首先加入“所有人都知道”这个算子：$E\phi \leftrightarrow \bigwedge_i K_i\phi$. 记 $E^k\phi$ 为 $\underbrace{E\ldots E}_{k}\phi$. 于是，共同知识算子 C 的语义定义为：

$$\mathcal{M}, w \vDash C\phi \iff \mathcal{M}, w \vDash E^k\phi, \quad k = 1, 2, \ldots$$

我们可以从图结构来理解共同知识算子. $\mathcal{M}, w \vDash E^k\phi$ 的含义是，从 w 出发走 k 步可到达的可能世界 v 上都有 $\mathcal{M}, v \vDash \phi$. $\mathcal{M}, w \vDash C\phi$ 的含义则是，从 w 出发可到达的可能世界 v 上都有 $\mathcal{M}, v \vDash \phi$.

类似算子 K_i，C 也有它对应的公理和推导规则.

公理 12.6 (不动点公理) $\vDash C\phi \leftrightarrow E(\phi \wedge C\phi)$.

共同知识是一个递归方程的（最小）解，这是一种不动点的视角.

规则 12.2 (归纳规则) 如果 $\mathcal{F} \vDash \phi \to E(\phi \wedge \psi)$，那么 $\mathcal{F} \vDash \phi \to C\psi$.

每个人都可以从真实中得到的知识，一定是共同知识. 将 S5 公理系统中加入关于 E 和 C 的公理，我们就扩展了认知逻辑. 因为 E 和 C 是用 K_i 定义的，因此他们本身并不会带来 Kripke 模型新的结构性质.

§12.2.1 “泥泞的孩童”再回顾

现在，我们可以形式化、严格讨论“泥泞的孩童”这一谜题了. 这一问题对应的逻辑语言是认知逻辑语言. 可能世界是 $\{0,1\}^n$ 的元素 $x = (x_1, \ldots, x_n)$，$x_i = 1$ 表示孩子 i 脸上有泥巴，$x_i = 0$ 表示 i 脸上没有泥巴. 假设每个孩童 i 对应的 R_i 都是一个等价关系. 当我们如此假设时，每个孩子唯一不是共同知识的事情就是脸上泥巴的状态，其他的所有事情都被隐含在了共同知识之中.

原子命题 p_i 表示孩子 i 脸上有泥巴，p 表示至少有一个孩子脸上有泥巴. 假设现在父亲还没有说出 p. 对于孩子 i，他的认知中只有两个可能世界：我的脸上有泥巴，或者我的脸上没有泥巴，其他对他来说都是确定的. 因此，xR_iy 当且仅当 $x_j = y_j$ 对任意 $j \neq i$ 成立. 于是，框架 $\mathcal{F}$ 会对应一个 n 维超立方体. $n = 3$ 的例子见图 12.1.

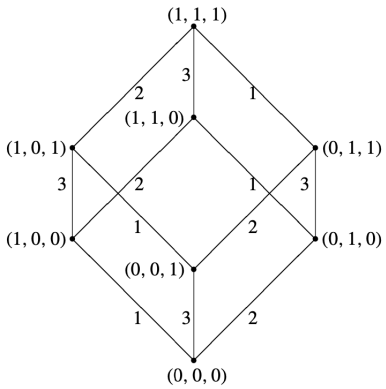


图 12.1: $n = 3$ 的情况

从框架 $\mathcal{F}$ 到模型 $\mathcal{M}$，我们还需要确定赋值 V. $w \in V(p_i)$ 当且仅当 $w_i = 1$. $w \in V(p)$ 当且仅当所有分量 w_j 不全为零. 从模型到点模型，我们还需要确定我们所处的可能世界，于是我们就可以讨论模态公式的可满足性. 例如：$\mathcal{M}, (1,0,1) \vDash Ep$，但是 $\mathcal{M}, (1,0,1) \vDash \neg E^2 p$.

假设现在父亲宣布了 p，那么 $\mathcal{F}$ 将会去掉 0 这个点，见图 12.2.

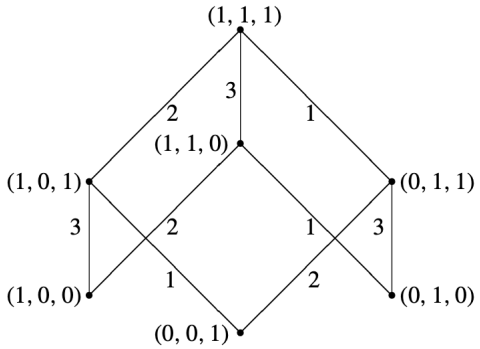


图 12.2: 父亲宣布 p 之后，图 12.1 的变化

在 i 眼中，只有两个可能世界，因此 i 回答“知道”意味着她能够确定只有一个世界；她回答不知道意味着还有两个可能世界. 假如现在是第一轮问答. 如果所有人都回答了“不知道”，考虑状态 $s = (1, 0, 0, \dots)$. 如果真实世界是 s，那么对于 1 来说，可能世界只有一个了，但是她却说“不知道”，说明真实世界不是 s. 同理，所有那些只有一个 1 的可能世界都会被消掉. 因此，归纳可得，第 k 轮的时候，所有那些只有 k 个 1 的可能世界会被消掉.

如果父亲没有宣布 p，那么 $\mathcal{M}$ 是一个超立方体. 无论在任何轮，每一个孩子都会觉得两个可能世界，因此不会有任何可能世界被消掉！因此，从结构上来说，父亲宣布 p 改变了每个孩子对应的 R_i 等价的可能世界，使得一些孩子可以确定自己所处的世界.

这一套方法可以将类似的智力谜题都用算法化的方式得到解答.

§12.2.2 Aumann 结构

如果我们限制 Kripke 模型中 R_i 为等价关系，那么认知逻辑还可以有另一种理解方式. 回忆：概率论（或者似然）理解世界的方式基于“事件”. 我们只能感知事件的发生与否，而不能具体知道是哪个样本点. 用事件的方式理解认知，得到的结构被称为 *Aumann 结构*.

考虑全集 Ω，理解为样本空间. 事件 $e \subseteq \Omega$ 是样本点的集合. 一次观测会落实在一个样本点 ω 上. 事件 e 发生当且仅当 $\omega \in e$. 在 Kripke 模型中，我们将 i 的知识刻画为了等价关系 R_i. 在 Aumann 结构中，对每一个个体 i，它的知识被刻画为 Ω 的划分 $\mathcal{P}_i = \{\Omega_j\}$，$\Omega_j$ 是 Ω 的子集. S_j 被称为 i 的*信息集*，可以被理解为 i 能够感知到的最基本的事件. $\mathcal{P}_i(\omega)$ 被定义为 ω 所属于的那个信息集.

现在我们重新定义算子 $K_i : 2^\Omega \to 2^\Omega$ 为 $K_i(e) := \{\omega \in \Omega : \mathcal{P}_i(\omega) \subseteq e\}$. $K_i(e)$ 定义

了“个体 i 知道事件 e”这一事件. 思想：将所有关于知识的讨论转化为关于事件的讨论. 类似地，可以定义算子 $E : 2^\Omega \to 2^\Omega$ 为 $E(e) = \bigcap_{i=1}^n K_i(e)$. 定义共同知识算子 $C : 2^\Omega \to 2^\Omega$ 为 $C(e) = \bigcap_{k=1}^\infty E^k(e)$.

我们再一次看到逻辑和集合的对应，我们总结如表 12.2 所示.

Kripke 模型	Aumann 结构
可能世界	样本点
公式	事件
原子命题	基本事件
模态算子	集合-集合映射
i 的等价关系 R_i	i 的划分
逻辑连接词	集合操作

表 12.2: 逻辑与集合的对应关系

Kripke 语义偏好逻辑，Aumann 结构偏好（Bayes）概率论，因此用数学来研究知识论就有了两种风格，一种是计算机、逻辑、哲学的风格，另一种是经济学、信息论的风格. 但是，这两种对应关系完全取决于我们对知识的那些基本假设，所以如果这些假设被打破，那么这样的对应关系就不再成立！

下面我们分别用这两种风格来讨论共同知识的意义.

§12.3 对不一致达成一致

本部分将用模态逻辑的方式来探讨达成一致与共同知识的关系. 最早由 Aumann 给出. 我们将要证明，对于有相同决策方式的两个个体来说，他们不可能对采取不同行动这件事具有共同知识. 典型故事：同样的 AI 之间会发生交易吗？交易发生意味着买家和卖家有不一样的决策（一个买一个卖）. 因此，如果两个人按照相同的规则来行事，那么不会有交易发生！

players cannot “agree to disagree”.

首先我们给出模型.

假想一个含时的系统，有两个玩家 1 和 2. 在任意时刻，每个玩家处于一个状态 s_i 之中. 每个玩家分别有一个自己的局部状态空间 S_i. 整个系统的全局状态是 $(s_1, s_2) \in$

$S_1 \times S_2 = \mathcal{G}$. 时刻是离散的，用非负整数 m 表示，初始时刻是 0. 系统的一次运行指的是函数 $r : m \mapsto (s_1, s_2)$. 运行描述了系统每一时刻的全局状态. 系统 $\mathcal{R}$ 指的是 $\mathcal{G}$ 上所有可能运行的集合. 给定 $r \in \mathcal{R}$，(r, m) 被称为系统 $\mathcal{R}$ 的一个点.

玩家处于某个状态的时候可以采取某种行动. 为了反映“玩家按照相同的规则行事”这件事，我们规定两个玩家的行动集都是 A，并且这一集合不依赖于全局或局部的状态. 给定所有人的行动和一个全局状态，我们可以定义系统的*转移函数*为 $\tau : A^2 \times \mathcal{G} \to \mathcal{G}$. 因此，转移函数描述了所有人的行动如何导致系统从一个状态到另一个状态.

如何描述“按照规则行事”? 我们用*协议*来描述这种概念. 玩家 i 的协议 P_i 是一个从局部状态 S_i 到行动集 A 的映射，即处于什么状态就做什么事. 两个玩家的联合协议记为 $P = (P_1, P_2)$.

一个联合协议要执行起来，还需要初始状态. 初始状态可能的集合记为 $\mathcal{G}_0$. 给定初始状态集 $\mathcal{G}_0$ 和转移函数 τ，我们就可以在系统上执行任何一种协议. 我们把元组 $\gamma = (\mathcal{G}_0, \tau)$ 称为系统的*上下文*.

给定上下文 $\gamma = (\mathcal{G}_0, \tau)$ 和一个联合协议 P，我们可以讨论 P 产生的所有可能运行. 一个运行 r 与 P *相容*指的是

- $r(0) \in \mathcal{G}_0$.
- 对任意时刻 m，如果 $r(m) = (s_1, s_2)$，那么 $r(m+1) = \tau(P(s_1), P(s_2))(s_1, s_2)$.

换言之，r 是从跟某个可能的初始状态开始执行协议产生的运行. 一个系统 $\mathcal{R}$ 表示了上下文 γ 和联合协议 P，指的是所有 $r \in \mathcal{R}$ 都与 P 相容. 这样的系统我们用记号 $\mathcal{R}^{rep}(P, \gamma)$ 来表示.

接下来我们引入 Kripke 模型. Kripke 模型的点是系统的点. 设原子命题集 $\mathbf{P}$，它的元素是 $perf_i(a)$，表示玩家 i 采取行动 a. 接下来我们定义赋值函数 V. 从 $\mathbf{P}$ 的定义来看，赋值应该只依赖状态，而不依赖时间，所以我们赋值函数实际上需要分两步来定义：

1. 定义 V 为从 $\mathbf{P}$ 到全局状态集合的映射，
2. 然后再扩展为到系统点集合的映射：$(r, m) \in V(p) \iff r(m) \in V(p)$.

第一步定义如下：状态 $s \in V(perf_i(a))$ 当且仅当在状态 s 玩家 i 采取过行动 a.

然后我们引入知识算子 K_i 的语义. 同样，我们假设 K_i 对应的是等价关系 $\sim_i$. 玩家 i 只能区分自己的局部状态 s_i，他执行协议时，只有状态，没有时间的概念. 因此我们定义 $(r, m) \sim_i (r', m') \iff r(m)_i = r'(m')_i$. 从 Aumann 结构来说，每一个局部状态 s_i 对应了一个信息集

$$IS_i(s_i, \mathcal{R}) = \{(r, m) : r \in \mathcal{R}, r(m) = s_i\}.$$

这样，我们就得到了 Kripke 点模型 $\mathcal{M}, (r, m)$. K_i 的语义按照基本认知逻辑定义即可.

接下来，我们引入关于时间的模态算子. 特别地，我们只引入算子 X，表示“下一时刻”. 它的语义定义为

$$\mathcal{M}, (r, m) \vDash X\phi \iff \mathcal{M}, (r, m+1) \vDash \phi.$$

有了算子 X，我们可以用公式表达“将要采取行动”:

$$act_i(a) = \neg perf_i(a) \wedge Xperf_i(a).$$

接下来，我们定义关于 Kripke 模型的*决策函数*，用它来在点模型的角度讨论协议的执行. 设 Kripke 模型的点集为 S. 玩家 i 的决策函数 D 是从 S 的某些子集到行动集 A 的映射. 我们没有写决策函数的下标，表明两个玩家采取了相同的决策策略. 决策函数描述的是：知道什么样的信息，就采取什么样的行动.

我们要求协议 P_i 和决策函数 D 是相容的，也就是决策函数在某个信息集上采取的行动恰好是这个协议在该状态要执行的行动:

$$P_i(s_i) = D(IS_i(s_i, \mathcal{R})), \forall s_i \in S_i.$$

反过来说，联合协议 P 在上下文 γ 中*实现了*决策函数 D，如果对所有 i，P_i 与 D 在系统 $\mathcal{R}^{rep}(P, \gamma)$ 中是相容的.

协议和决策函数是两个非常容易混淆的概念，尽管他们有密切联系. 直观来说，协议就是处于什么局部状态采取什么行动，这并不涉及知识的内容. 而决策函数指的是，知道什么信息就采取什么行动，这完全是知识的内容. 在我们的背景下，

$$\text{知道的信息} = \text{处于的局部状态}.$$

因此二者其实是从不同角度描述同一个概念.

我们对决策函数 D 有一个额外的技术要求，我们要求 D 是*并-一致*的. 具体来说，给定 S 一列互不相交的子集 $T_1, \ldots, T_k$，每一个都有 $D(T_i) = a$，那么我们要求 $D(\cup_i T_i) = a$. 考虑一个具体的例子，假设我的决策函数是这样描述的：如果今天下雨，并且今天星期四，那么我会去 KFC 疯狂星期四；如果今天不下雨，并且今天星期四，那么我会去 KFC 疯狂星期四. 那么，我的决策还应该有：虽然我不知道今天下不下雨，但是如果今天是星期四，那么我会去 KFC 疯狂星期四. 可以证明，任何联合协议都可以从某个并-一致的决策函数产生.

至此，模型就已经陈述完了，我们总结一下. 两个玩家处于同一个系统中，每个玩家可能知道不同的东西（局部状态空间不同，信息集不同），但是他们的行动集相同、决策

函数相同，决策函数要求是并-一致的，由某个联合协议实现，给定可能的初始状态和系统的转移函数（上下文），系统可以产生一系列可能的运行.

利用这一模型，我们就可以叙述并证明 Aumann 达成一致定理了.

定理 12.1 (Aumann 达成一致定理) *给定联合协议 P，上下文 γ，由此产生 Kripke 框架 $\mathcal{F}$. 设 $a,b \in A$ 是两个不同的行动，如果在上下文 γ 中 P 实现了某个并-一致决策函数，那么*

$$\mathcal{F} \vDash \neg C(act_1(a) \wedge act_2(b)).$$

如果两个玩家选择了同样的并-一致决策函数，那么他们不可能对“我们采取不同行动”这件事形成共同知识，所以他们不可能对不一致达成一致（agree to disagree）.

证明. 用反证法. 假设某个基于 $\mathcal{F}$ 的点模型 $\mathcal{M},(r,m)$ 使得

$$\mathcal{M},(r,m) \vDash C(act_1(a) \wedge act_2(b)).$$

我们证明 $a = b$. 思路如下：共同知识对应了从 (r,m) 出发可到达的状态集 S' 的性质. 从玩家 1 的视角来看，她在 S' 所关联的信息集上都要采取行动 a，根据并-一致性，应该有 $D(S') = a$. 从玩家 2 来看同理，因此也应该有 $D(S') = b$. 因此 $a = b$.

假设 S' 是从 (r,m) 出发，通过关系 $\sim_1$ 或 $\sim_2$ 可到达的点集. 取一个点 $(r',m') \in S'$，设 $r'(m')_1 = s_1'$. 假设 $(r'',m'') \sim_1 (r',m')$，那么 $(r'',m'') \in S'$. 因此，$IS_1(s_1',\mathcal{R}) \subseteq S'$. 当 s_1' 取遍 S_1，根据信息集的性质，S' 是 $IS_1(s_1',\mathcal{R})$ 的不交并.

因为 $\mathcal{M},(r,m) \vDash C(act_1(a))$,所以有 $\mathcal{M},(r',m') \vDash act_1(a)$. 这一公式意味着 $P_1(s_1') = a$. 根据 P 和 D 的关系，这等价于 $D(IS_1(s_1',\mathcal{R})) = a$. 因为这件事对任意 s_1' 都成立，根据 D 的并-一致性，$D(S') = a$. 同理，从玩家 2 的角度来说 $D(S') = b$. 因此 $a = b$. □

> **注.** 我们的定理是对于确定性的协议证明的. 然而，一个协议可能是非确定的，也就是在一个状态可能会有多种行动的选择，比如选择带有随机性. 这个时候，达成一致定理依然成立，但是我们需要恰当地定义 Kripke 模型、决策函数以适应非确定性的协议. 当协议具有非确定性时，我们可以用这一模型来理解带有先验知识（分布）、风险或者不确定性下的达成一致定理，只要协议能够对应一个并-一致的决策函数，结论都有效.

§12.4 Rubinstein 电子邮件博弈

接下来我们使用 Bayes 概率论来说明在二人静态博弈中，共同知识对到底实现哪一个 Nash 均衡非常关键. 此时，知道一件事与否被赋予了不确定性的含义：我确定或不确定某件事发生.

考虑两个玩家和两个可能的收益矩阵：

	A	B
A	$(0,0)$	$(-10,1)$
B	$(1,-10)$	$(8,8)$

	A	B
A	$(8,8)$	$(-10,1)$
B	$(1,-10)$	$(0,0)$

在左边的矩阵中，(B,B) 是唯一的 Nash 均衡．在右边的矩阵中有多个 Nash 均衡：(A,A) 和 (B,B)．(A,A) 给出比 (B,B) 更高的收益，但行动 A 比 B 更有风险．

左边矩阵被选择的概率是 $p > 1/2$．玩家 1 知道真实的矩阵，而玩家 2 不知道．如果选择了右边矩阵，玩家 1 会给玩家 2 发送一条消息．如果玩家 2 收到了消息，她会回复．如果玩家 1 收到了回复，她会发送第二条消息来确认她收到了玩家 2 的回复．以此类推．每条消息都以 ϵ 的概率独立等可能丢失．[1]

以上传信的过程可以用 Bayes 博弈的类型来刻画．具体来说，两个玩家的类型集合为 $\Theta_i = \{\theta_i^0, \theta_i^1, \theta_i^2, \dots\}$．$\theta_i^m$ 表示玩家 i 发了 m 封邮件．θ_i^m 有直观的含义．例如，类型 θ_1^0 表示真实收益矩阵是左边的．而类型 θ_1^1 表示真实收益矩阵是右边的，1 发送了一封电子邮件，但 2 没有收到．

实际上，θ 包含了所有可能的情况：

- (θ_1^0, θ_2^0)：真实收益矩阵是左边的．
- (θ_1^1, θ_2^0)：真实收益矩阵是右边的，1 发送了一封电子邮件，但 2 没有收到．
- (θ_1^1, θ_2^1)：真实收益矩阵是右边的，2 收到了第一封电子邮件，但 1 没有收到 2 的回复．
- ……

我们可以算出来，当真实矩阵为左边矩阵时，每个类型出现的概率：首先，以概率

左	θ_2^0	θ_2^1	θ_2^2	$\cdots$
θ_1^0	p	0	0	$\cdots$
θ_1^1	0	0	0	$\cdots$
θ_1^2	0	0	0	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

p 选择左边的矩阵，而且没有人发送消息．因此，(θ_1^0, θ_2^0) 的概率是 p，其他项概率都是 0．

同样可以算出来，当真实矩阵为右边矩阵时，每个类型出现的概率：首先，以概率

[1] 注意：发送电子邮件不是一个行动，而是一个规则．

右	θ_2^0	θ_2^1	θ_2^2	$\cdots$
θ_1^0	0	0	0	$\cdots$
θ_1^1	$\epsilon(1-p)$	$\epsilon(1-\epsilon)(1-p)$	0	$\cdots$
θ_1^2	0	$\epsilon(1-\epsilon)^2(1-p)$	$\epsilon(1-\epsilon)^3(1-p)$	$\cdots$
θ_1^3	0	0	$\epsilon(1-\epsilon)^4(1-p)$	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$

$1-p$ 选择右边的矩阵，玩家 1 发送一条消息，它会以概率 ϵ 丢失. 因此，(θ_1^1, θ_2^0) 的概率是 $\epsilon(1-p)$. 以此类推，可以得到计算.

对类型 θ_i^m，收益矩阵是到第 m 层的共同知识，即 E^m. 所以对于很大的 m，收益矩阵是“几乎公共知识”. 信息结构是玩家的共同知识，玩家们进行博弈. 关键问题：这个博弈的 BNE 是什么?

我们需要弄清楚对每个类型 θ_i^m，玩家会做什么. 假设玩家 1 的类型为 θ_1^0. 玩家 1 知道 (θ_1^0, θ_2^0) 是真实的类型，所以左边的矩阵被选择. 据此推理：玩家 1 选择占优策略 B.

假设玩家 2 的类型为 θ_2^0. Bayes 定理意味着：

$$\Pr(\theta_1^0|\theta_2^0) = \frac{p}{p+\epsilon(1-p)} := \mu_2^0.$$

此时，左边的矩阵被选择.

$$\Pr(\theta_1^1|\theta_2^0) = 1-\mu_2^0.$$

此时，右边的矩阵被选择.

选择 B 的期望收益至少是 $8\mu_2^0$. 推理如下：类型 θ_1^0 时肯定选择 B，因此最坏的情况是 θ_1^1 选择 B.

选择 A 的期望收益最多是 $-10\mu_2^0 + 8(1-\mu_2^0)$. 推理如下：类型 θ_0^1 肯定选择 B，因此最好的情况是 θ_1^1 选择 A.

综合两方面，B 更好，因为对于所有 ϵ，$\mu_2^0 \geq p > \frac{1}{2}$.

假设玩家 1 的类型为 θ_1^1，于是，右边的矩阵被选择. Bayes 定理意味着：$\Pr(\theta_2^0|\theta_1^1) = \frac{\epsilon(1-p)}{\epsilon(1-p)+\epsilon(1-\epsilon)(1-p)} = \frac{1}{2-\epsilon} := \mu_1^1$. 另一方面，$\Pr(\theta_2^1|\theta_1^1) = 1-\mu_1^1$.

选择 B 的期望收益至少为 0. 推理如下：类型 θ_2^0 肯定选择 B，因此最坏的情况是 θ_2^1 选择 B.

选择 A 的期望收益最多为 $-10\mu_1^1 + 8(1-\mu_1^1)$. 推理如下：类型 θ_2^0 肯定选择 B. 最好的情况是 θ_2^1 选择 A.

综合两方面，B 更好，因为对于所有 ϵ，$\mu_1^1 > \frac{1}{2}$.

逐步迭代上述过程，我们发现，在唯一的 BNE 中，所有类型都选择 B. 然而，如果右边的矩阵是共同知识，(A, A) 是一个严格 Nash 均衡. 所以，即便收益矩阵是“几乎共同知识”，Nash 均衡也不一定是一个可实现的均衡.

注. [lhy: 仔细改一改] 关于均衡的进一步思考

- 用 $Nash(x)$ 表示“x 是 Nash 均衡”，那么 $\exists x C(Nash(x))$ 和 $C(\exists x C(Nash(x)))$ 的含义是否一样?
- 如果不引入不确定性，在完全信息下，实现特定的 Nash 均衡是否还需要共同知识?
- 如果玩家不是逻辑全知的，或者说她的推理、计算能力是有限的，那么 Nash 均衡还是否会达到？是否可接近?

第六部分

附录：预备知识

附录 A　线性代数基础

§A.1　线性空间

从动机上说，线性空间试图将 $\mathbb{R}^n$ 或者 $\mathbb{C}^n$ 这样的集合连同他们上面的代数结构抽象出来. 除此之外，函数和无穷数列的集合也是非常重要的对象，比如说 $\mathbb{R}$ 上的连续函数组成的集合 $C(\mathbb{R})$，或者具有“模长”的无穷复数列（ℓ^2 空间）：

$$\ell^2 = \left\{ (x_1, x_2, \cdots) \in \mathbb{C}^\infty : \sum_{i=1}^{\infty} x_i^2 < \infty \right\}.$$

我们将这些对象的共性抽象出来，得到线性空间的概念. 线性空间都是基于某个域定义的，我们先给出域的定义.

定义 A.1 (域) 一个域是一个集合 F，其上定义了两种二元运算：加法 $+$ 和乘法 $\cdot$，他们都是 $F \times F$ 到 F 的映射，满足下面的公理：

1. （结合律）对于任意的 $a, b, c \in F$，有 $(a+b)+c = a+(b+c)$ 和 $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$；
2. （交换律）对于任意的 $a, b \in F$，有 $a + b = b + a$ 和 $a \cdot b = b \cdot a$；
3. （分配律）对于任意的 $a, b, c \in F$，有 $a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$.
4. （单位元）存在唯一的两个元素 $0, 1 \in F$，使得对于任意的 $a \in F$，有 $a + 0 = a$ 和 $a \cdot 1 = a$；
5. （加法逆元）对于任意的 $a \in F$，存在唯一 $b \in F$，使得 $a + b = 0$，记 b 作 $-a$；
6. （乘法逆元）对于任意的 $a \in F$，如果 $a \neq 0$，则存在唯一 $b \in F$，使得 $a \cdot b = 1$，记 b 作 a^{-1}.

通常将 $a \cdot b$ 写作 ab，并且乘法的优先级高于加法，即 $ab + c = (ab) + c$.

域的重要例子包括有理数域 $\mathbb{Q}$，实数域 $\mathbb{R}$ 和复数域 $\mathbb{C}$，他们都是无限域. 我们将在后面的内容中使用这些域. 接下来，我们定义线性空间.

定义 A.2 (线性空间，向量空间) 设 V 是一个集合，F 是一个域. 如果在 V 上定义了两种运算：加法 $+$ 和数乘 $\cdot$，使得 V 满足下面的公理：

1.（V 的结合律）对于任意的 $x,y,z \in V$，有 $(x+y)+z = x+(y+z)$；

2.（V 的交换律）对于任意的 $x,y \in V$，有 $x+y = y+x$；

3.（加法零元）存在唯一的元素 $0 \in V$，使得对于任意的 $x \in V$，有 $x+0 = x$；

4.（加法逆元）对于任意的 $x \in V$，存在唯一 $y \in V$，使得 $x+y = 0$，记 y 作 $-x$；

5. 对于任意的 $x \in V$，有 $1 \cdot x = x$；

6. 对于任意的 $a,b \in F$ 和 $x \in V$，有 $(ab) \cdot x = a \cdot (b \cdot x)$；

7. 对于任意的 $a \in F$ 和 $x,y \in V$，有 $a \cdot (x+y) = a \cdot x + a \cdot y$；

8. 对于任意的 $a,b \in F$ 和 $x \in V$，有 $(a+b) \cdot x = a \cdot x + b \cdot x$.

则称 V 是一个 **F-线性空间**，简称**线性空间**，也称**向量空间**. V 中的元素被称为**向量**. 通常将数乘 $a \cdot x$ 写作 ax，并且乘法的优先级高于加法，即 $a \cdot x + y = (a \cdot x) + y$.

“线性”一词的含义是指的 $ax+by$ 这种形式的数学对象，线性代数就是研究这种对象的学科. 线性空间的典型例子包括：

- $\mathbb{R}^n$ 和 $\mathbb{C}^n$.
- $M_{m\times n}(F)$，即所有 $m \times n$ 矩阵组成的集合.
- $C(\mathbb{R})$，即 $\mathbb{R}$ 上的连续函数组成的集合.
- $C^k(\mathbb{R})$，即 $\mathbb{R}$ 上的 k 次连续可微函数组成的集合.
- ℓ^2 空间，即所有二次可和的复数序列组成的集合.

如同所有其他的代数结构，线性空间也有各式各样构造新的线性空间的方法. 为了看出来线性空间本质的特性，我们有如下引理：

引理 A.1 *设 V 是 F-线性空间，W 是 V 的一个子集. 则 W 是一个线性空间当且仅当对任意 $a,b \in F$ 和 $x,y \in W$，有 $ax+by \in W$.*

证明. 按照定义即可验证. □

我们给 $ax+by$ 这样的对象一个正式的定义.

定义 A.3 (线性组合) 设 V 是 F-线性空间，$x_1,\cdots,x_n\in V$，$a_1,\cdots,a_n\in F$，则称 $a_1x_1+\cdots+a_nx_n$ 是 $x_1,\cdots,x_n$ 的一个**线性组合**.

接下来，基于某些特定的线性空间，我们构造各种新的线性空间.

定义 A.4 (线性子空间) 设 V 是 F-线性空间，W 是 V 的一个子集. 如果 W 是一个线性空间，则称 W 是 V 的一个**线性子空间**.

例如，$\mathbb{Q}$ 是 $\mathbb{R}$ 的一个线性子空间，但 $\mathbb{Z}$ 不是 $\mathbb{R}$ 的一个线性子空间. 再比如，当 $k<l$，$C^k(\mathbb{R})$ 是 $C^l(\mathbb{R})$ 的一个线性子空间.

定义 A.5 (乘积空间) 设 $V_1,\cdots,V_n$ 是 F-线性空间，则 $V_1\times\cdots\times V_n$ 是一个 F-线性空间，其中加法和数乘分别定义为

$$\begin{aligned}&(x_1,\cdots,x_n)+(y_1,\cdots,y_n)=(x_1+y_1,\cdots,x_n+y_n),\\&a(x_1,\cdots,x_n)=(ax_1,\cdots,ax_n).\end{aligned}$$

例如，$\mathbb{R}^n$ 就是 n 个 $\mathbb{R}$ 的乘积空间，$M_{m\times n}(F)$ 就是 $m\times n$ 个 F 的乘积空间.

接下来，我们按照表示论的观点，引入基的概念. 线性空间是抽象的数学概念，因此我们需要一些具体的元素去表示这整个空间.

定义 A.6 (生成集) 设 V 是 F-线性空间，$S\subseteq V$，如果 V 中的每一个元素都是 S 的线性组合，则称 S 是 V 的一个**生成集**.

更一般地，任意一个 $S\subseteq V$，我们可以定义 S **生成的线性子空间**为所有 S 的线性组合的集合，记为 $\mathrm{Span}(S)$.

我们希望用尽可能少的元素来表示整个线性空间，为此，我们需要把“可表示”这样的概念严格化.

定义 A.7 (线性相关) 设 V 是 F-线性空间，$S\subseteq V$，如果存在 $x_1,\cdots,x_n\in S$，$a_1,\cdots,a_n\in F$，使得 $a_1x_1+\cdots+a_nx_n=0$，且至少有一个 $a_i\neq 0$，则称 S 是**线性相关**的，否则称 S 是**线性无关**的.

S 线性相关意味着 S 中的一些元素可以被另一些元素的线性组合表示出来，因而 S 中有一些冗余. 线性无关意味着 S 中的元素都是必要的，没有冗余. 由此，我们可以给出基的定义.

定义 A.8 (基) 设 V 是 F-线性空间，$S \subseteq V$，如果 S 是线性无关的，并且 $\mathrm{Span}(S) = V$，则称 S 是 V 的一个**基**.

线性空间的一个核心定理是基的存在性定理.

定理 A.1 (基的存在性定理) *设 V 是 F-线性空间，则 V 中存在一个基.*

要注意，这一定理不是平凡的. 首先，基是线性无关的集合，所以 V 本身通常就不是基. 此外，这一定理要求有一个线性无关的集合 $S \subseteq V$，任意向量 $x \in V$ 都可以用 S 中有限个元素的线性组合来表示，这样的 S 并不容易找到. 该定理的证明是构造性的，这一构造依赖于选择公理（或者 Zorn 引理），我们在此略去.

基的典型例子包括：

- $\mathbb{R}^n$ 的标准基是 $\{e_1, \cdots, e_n\}$，其中 e_i 是第 i 个分量为 1，其余分量为 0 的向量.
- 特别地，$\mathbb{R}$ 的基就是 $\{1\}$，一般地，域 F 作为线性空间的时候，其基就是 $\{1\}$. 但如果我们把 $\mathbb{C}$ 看成 $\mathbb{R}$ 的线性空间，那么 $\mathbb{C}$ 的基就是 $\{1, i\}$.
- $M_{m\times n}(F)$ 的标准基是 $\{E_{ij} : 1 \le i \le m, 1 \le j \le n\}$，其中 E_{ij} 是第 i 行第 j 列为 1，其余元素为 0 的矩阵.

特别注意，无穷维空间经常违背直觉. 例如，考虑 ℓ^2 空间和向量组 $\{e_1, e_2, \cdots\}$，其中 e_i 是第 i 个分量为 1，其余分量为 0 的实数列. 这个向量组看上去非常像一个基，然而并非如此！比如说，$(1/n)_{n=1}^{\infty} \in \ell^2$，但是它不能写成有限个 e_i 的线性组合. 实际上，ℓ^2 空间的基一定是不可数的.

给定一个基，我们可以用基来表示线性空间中的元素，容易证明，这一表示是唯一的. 因此，我们可以把线性空间中的元素看成基的线性组合，因而有了下面的定义.

定义 A.9 (坐标) 设 V 是 F-线性空间，S 是 V 的一个基，$x \in V$，如果 $x = \sum_{v\in S} a_v v$，则称 $(a_v)_{v\in S}$ 是 x 在基 S 下的**坐标**.

例如，$\mathbb{R}^3$ 的标准基是 $\{e_1, e_2, e_3\}$. 任意 $x \in \mathbb{R}^3$ 都可以表示为 $x = a_1e_1 + a_2e_2 + a_3e_3$，其中 a_i 是 x 的第 i 个分量. 因此，我们可以把 x 看成一个三元组 (a_1, a_2, a_3)，这就是 x 在标准基下的坐标. 这样的讨论也适用于 $\mathbb{R}^n$ 或 $\mathbb{C}^n$. 另外，坐标本身的集合也可以被看作是一个线性空间，例如，$\mathbb{R}^3$ 的坐标集合就是 $\mathbb{R}^3$ 本身.

线性空间的基可以衡量线性空间的复杂程度，基元素越少，线性空间越简单. 我们可以定义维数来衡量线性空间的复杂程度.

定义 A.10 (维数) 设 V 是 F-线性空间，如果 V 的一个基有限，则称 V 是**有限维**的，否则称 V 是**无限维**的. 有限维线性空间的基的元素个数称为 V 的**维数**，记为 $\dim V$.

这一定义隐含的事实是，如果 V 有有限基，那么所有基都是有限的，并且任意两个基的元素个数相同. 我们这里略去证明.

例如，$\mathbb{R}^n$ 的维数是 n，$M_{m\times n}(F)$ 的维数是 mn，$C^k(\mathbb{R})$ 和 ℓ^2 都是无穷维的.

线性空间可以按照维数递降进行分解，变成越来越简单的线性空间的组合. 这种组合称为*直和*.

定义 A.11 (和空间与直和) 设 V 是 F-线性空间，$U_1, U_2 \subseteq V$ 是 V 的子空间，定义他们的和空间为

$$U_1 + U_2 = \{u_1 + u_2 : u_1 \in U_1, u_2 \in U_2\}.$$

如果 $U_1 \cap U_2 = \{0\}$，换句话说，U_1 与 U_2 线性无关，则称 $U_1 + U_2$ 是**直和**，记为 $U_1 \oplus U_2$. 如果 $V = U_1 \oplus U_2$，则称 U_1 和 U_2 是 V 的**直和分解**.

例如，$\mathbb{R}^3$ 可以分解为 $\mathbb{R}^3 = \mathbb{R}e_1 \oplus \mathbb{R}e_2 \oplus \mathbb{R}e_3$，其中 $\mathbb{R}e_i = \{\alpha e_i : \alpha \in \mathbb{R}\}$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的一维子空间，它们的直和就是 $\mathbb{R}^3$. 注意到这个分解将三维线性空间分解成了三个一维线性空间，这不是偶然的，一般地，我们有下面的定理.

定理 A.2 (维数定理) *设 V 是有限维 F-线性空间，$V = U_1 \oplus U_2$，则*

$$\dim V = \dim U_1 + \dim U_2.$$

证明. 设 S_1 是 U_1 的一个基，S_2 是 U_2 的一个基，那么根据直和的定义，$S_1 \cup S_2$ 是 V 的一个基. 因为 $S_1 \cup S_2$ 是线性无关的，所以必然有 $S_1 \cap S_2 = \varnothing$. 又由于 V 中的任意元素都可以写成 $S_1 \cup S_2$ 中元素的线性组合，因此

$$\dim V = |S_1 \cup S_2| = |S_1| + |S_2| = \dim U_1 + \dim U_2. \qquad \square$$

通过直和分解，我们可以把线性空间分成越来越简单的部分.

§A.2 线性映射

接下来我们研究线性空间之间的关系. 并不是所有的关系都是重要的，我们所关心的是保持线性空间代数结构的这种关系，这种关系称为*线性映射*.

定义 A.12 (线性映射，线性算子，线性函数) 设 V 和 W 是 F-线性空间，如果映射 $f: V \to W$ 满足：

1. 对任意 $x, y \in V$，$f(x+y) = f(x) + f(y)$；
2. 对任意 $x \in V$ 和 $a \in F$，$f(ax) = af(x)$，

则称 f 是 V 到 W 的一个**线性映射**. 如果 $V = W$，则称 f 是 V 上的一个**线性算子**或**线性变换**. 如果 $W = F$，则称 f 是 V 上的一个**线性函数**.

一个更简洁但也更本质的定义是，线性映射是保持线性组合的映射.

例 A.1 一个平凡的例子是零映射：$f: V \to W$，$f(x) = 0$，这显然是线性映射，我们通常记为 O. 另一个平凡的例子是恒等映射：$f: V \to V$，$f(x) = x$，这也是线性映射，我们通常记为 id. □

线性映射有如下基本性质：

命题 A.1 *设 $f: V \to W$ 是域 F 上的线性映射，那么*

1. $f(0) = 0$；
2. $f(-x) = -f(x)$；
3. $f(\sum_{i=1}^{n} a_i x_i) = \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$；
4. *如果 $g: W \to Z$ 是线性映射，则 $g \circ f: V \to Z$ 也是线性映射；*
5. *如果 $g: V \to W$ 是线性映射，$a, b \in F$，则 $af + bg: x \mapsto af(x) + bg(x)$ 也是线性映射；也是线性映射；*
6. *如果 $g: V \to W$ 是线性映射，$h: W \to Z$ 是线性映射，$k: Z \to V$ 是线性映射，则 $h \circ (f+g) = h \circ f + h \circ g$，$(f+g) \circ k = f \circ k + g \circ k$；*
7. *如果 f 是双射，则 f^{-1} 也是线性映射.*

证明. 按照定义验证即可. □

为了简化记号，我们会将线性映射 f 的作用 $f(x)$ 简记为 fx，线性映射的复合 $g \circ f$ 简记为 gf，同一线性映射 f 的 n 次复合简记为 f^n. 对于多项式函数 $G(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$，我们可以定义一个新的线性映射 $G(f) = a_0 \mathrm{id} + a_1 f + \cdots + a_n f^n$.

线性映射可以被看成一种滤镜，它可以将原始的空间进行变形，变成一个新的空间. 比如说，海上的月亮，就是将三维空间的太阳与空间映到了海面上. 而线性算子则是一种特殊的线性映射，它将原始空间变形成自身. 如果我们把线性空间看成一块橡皮泥，那么线性算子可以被看成某种拉伸，橡皮泥这个整体没有变多或者变少，但是橡皮泥的形状发生了改变.

下面我们考虑两个线性映射的例子.

例 A.2 (微分算子) 考虑 $C^\infty(\mathbb{R})$，即任意次可微的实函数空间. 求导 $\mathrm{d}/\mathrm{d}x : C^\infty(\mathbb{R}) \to C^\infty(\mathbb{R})$ 被称为**微分算子**. 容易验证，$\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ 是线性算子. □

例 A.3 (投影变换) 这个例子实际上是海上升明月的一般化. 考虑 $\mathbb{R}^n$，设 $m \leq n$. 映射

$$\pi_m : (x_1, \ldots, x_n) \mapsto (x_1, \ldots, x_m, 0, \ldots, 0)$$

称为 $\mathbb{R}^n$ 的**投影变换**. 容易验证，π_m 是线性算子. 此外，实际上，π_m 也可以被看作是 $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}^m$ 的线性映射，将 $(x_1, \ldots, x_m, 0, \ldots, 0)$ 后面的 0 都丢掉，这就是一个 $\mathbb{R}^m$ 的元素. □

从投影变换的例子中，我们可以体会到线性空间的微妙之处：不同的线性空间可能有着完全相同的本质. 由 $(x_1, \ldots, x_m, 0, \ldots, 0)$ 形成的空间实际上就是 $\mathbb{R}^m$，只是我们用了 $\mathbb{R}^n$ 的元素来表示它. 这里引申出来了代数中两个重要的概念：同态与同构.

定义 A.13 (同态与同构) 设 V 和 W 是 F-线性空间，如果映射 $f : V \to W$ 满足：

1. 对任意 $x, y \in V$，$f(x+y) = f(x) + f(y)$；
2. 对任意 $x \in V$ 和 $a \in F$，$f(ax) = af(x)$，

则称 f 是 V 到 W 的一个**同态**. 如果 f 是一个满射，那么称 f 是一个**满同态**；如果 f 还是一个单射，那么称 f 是一个**同构**.

线性空间之间的同态实际上就是线性空间之间的线性映射，所以同态是平凡的概念. 同态这个词表明了两个线性空间的相似性，一个空间丢掉一些东西之后就可以被看成另一个空间的子空间. 而满同态则是说，丢掉一些东西之后，这个空间就是另一个空间. 比如说，如果 $m < n$，丢掉 $\mathbb{R}^n$ 中元素的后面 $n-m$ 个分量，就得到了 $\mathbb{R}^m$，这就是一个满同态. 同构则是说，这两个线性空间就是一样的，没有谁比谁更复杂，比如说，$\mathbb{R}^n$ 和 $\mathbb{R}^m$ 就是同构的，只要 $n = m$.

刚刚讨论的 $\mathbb{R}^m$ 与 $\mathbb{R}^n$ 的同构是具有一般性的，这就是有限维线性空间的同构定理：

定理 A.3 (有限维线性空间的同构定理) *设 V 和 W 是有限维 F-线性空间，则 V 与 W 同构当且仅当 $\dim V = \dim W$.*

这一定理充分说明了，有限维线性空间中维数的意义：维数刻画了线性空间.

证明. 这一证明的思路是典型的：先定义一个（与基相关的）基本映射，然后进行扩张.

$\Longleftarrow$：如果 $\dim V = \dim W = n$，那么两个线性空间的基的元素个数是一样的，我们可以将它们一一对应起来. 比方说 V 的基是 $\{v_1, \ldots, v_n\}$，W 的基是 $\{w_1, \ldots, w_n\}$，那么我们可以定义两个基之间的映射 f，使得 $f(v_i) = w_i$.

我们可以将 f 扩张成一个线性映射. 比如说，对于任意的 $x \in V$，它用基表示就是 $\sum_{i=1}^n a_i v_i$. 我们可以定义

$$f(x) = f\left(\sum_{i=1}^n a_i v_i\right) = \sum_{i=1}^n a_i f(v_i) = \sum_{i=1}^n a_i w_i.$$

接下来验证 f 是 V 到 W 同构. 首先，按照定义就可以验证这是一个线性映射. 其次，因为 a_i 是任意的，所以这显然也是一个满射. 最后，如果有两个不同的 x, y 对应相同的 $f(x) = f(y)$，那么 $f(x)$ 和 $f(y)$ 的坐标是一样的，所以 x 和 y 的坐标也是一样的，所以 $x = y$，所以 f 也是一个单射.

$\Longrightarrow$：设两个线性空间由映射 $f : V \to W$ 给出同构. 假设 V 的基是 $\{v_1, \ldots, v_n\}$，我们证明 W 的基就是 $\{f(v_1), \ldots, f(v_n)\}$.

首先，因为 f 是满射，而 v_i 生成了整个 V，所以 $f(v_i)$ 生成了整个 W.

再说明 $f(v_i)$ 线性无关. 假设 $\sum_{i=1}^n a_i f(v_i) = 0$，那么 $f(\sum_{i=1}^n a_i v_i) = 0$，由于 f 是单射，所以 $\sum_{i=1}^n a_i v_i = 0$，由于 v_i 线性无关，所以 $a_i = 0$，所以 $f(v_i)$ 线性无关.

以上两点证明了 W 的基是 $\{f(v_1), \ldots, f(v_n)\}$，所以 $\dim V = \dim W$. □

此外，同构还有一个重要性质：

命题 A.2 *假设 $f : V \to W$ 和 $g : W \to U$ 是两个线性映射，如果 f 和 g 都是同构，那么 $g \circ f$ 也是同构.*

证明. 根据定义即可证明. □

接下来我们进一步研究线性映射所带来的结构. 我们刚刚说过，同态就是说把一些东西丢掉，剩下的东西可以被看成另一个空间的子空间. 丢掉的东西是和剩下的东西，就是线性映射的核与像.

定义 A.14 (核与像) 设 V 和 W 是 F-线性空间，$f : V \to W$ 是一个线性映射. f 的**核**定义为 $\ker f = \{x \in V : f(x) = 0\}$，$f$ 的**像**定义为 $\operatorname{Im} f = \{f(x) : x \in V\}$.

“把一些东西丢掉”这一表述可以精确地由以下定理给出：

定理 A.4 设 V 和 W 是 F-线性空间，$f : V \to W$ 是一个线性映射，则 $\ker f$ 是 V 的线性子空间，$\operatorname{Im} f$ 是 W 的线性子空间. 另外，

$$\dim V = \dim \ker f + \dim \operatorname{Im} f.$$

直观来说，这一定理表明，线性映射 f 把 V 抹掉了子空间 $\ker f$，最终得到了空间 $\operatorname{Im} f$.

证明. 这一证明类似于定理 A.3 的证明，这里只给出思路，细节留给读者. 首先选出 $\ker f$ 的基 $v_1, \ldots, v_k$，然后添加向量 $u_1, \ldots, u_l$ 扩充成 V 的基，然后证明 $f(u_1), \ldots, f(u_l)$ 是 $\operatorname{Im} f$ 的基. □

一个直接但重要的推论是：

推论 A.1 设 V 和 W 是 F-线性空间，$f : V \to W$ 是一个线性映射. 那么以下性质成立：

1. $\dim \operatorname{Im} f \leq \dim V$，等号成立当且仅当 $\ker f = \{0\}$；
2. f 是单射当且仅当 $\ker f = \{0\}$；
3. f 是满射当且仅当 $\dim \operatorname{Im} f = \dim W$；
4. f 是同构当且仅当 $\ker f = \{0\}$ 且 $\dim \operatorname{Im} f = \dim W$.

这一推论给了我们判断一个线性映射是否是单射、满射或者同构的方法.

最后，我们引入线性映射的秩的概念：

定义 A.15 (线性映射的秩) 设 V 和 W 是 F-线性空间，$f : V \to W$ 是一个线性映射. f 的**秩**定义为 $\operatorname{rank} f = \dim \operatorname{Im} f$.

换言之，线性映射的秩就是它的像的维数. 秩越高的线性映射说明它把空间“压缩”得越少，丢掉的东西越少. 例如，$\mathbb{R}^n$ 的投影变换 π_m 的秩为 m，说明它丢掉的东西只有 $n - m$ 维，也就是后面的 $n - m$ 个坐标.

推论 A.1 给出了复合线性映射秩的性质：

推论 A.2 设 V、W 和 U 是 F-线性空间，$f : V \to W$ 和 $g : W \to U$ 是两个线性映射，则 $\operatorname{rank}(g \circ f) \leq \operatorname{rank} f$，等号成立当且仅当 $\operatorname{Im} f \cap \ker g = \{0\}$. 特别地，如果 f, g 都是满射，那么等号成立当且仅当 g 是同构. 此外，$\operatorname{rank}(g \circ f) \leq \operatorname{rank} g$，如果 f 是满射，那么等号成立.

证明. 根据推论 A.1，我们有 $\operatorname{rank}(g\circ f)=\dim\operatorname{Im}(g\circ f)\leq\dim\operatorname{Im}f=\operatorname{rank}f$. 等号成立当且仅当在空间 $\operatorname{Im}f$ 中 g 的核是 $\{0\}$，换言之，$\operatorname{Im}f\cap\ker g=\{0\}$. 特别地，如果 f 是满射，那么这一条件变为 $\ker g=\{0\}$，如果 g 也是满射，那么 g 是同构.

此外，因为 $\operatorname{Im}f\subseteq W$，所以 $\operatorname{Im}(g\circ f)\subseteq\operatorname{Im}g$，因此 $\operatorname{rank}(g\circ f)=\dim\operatorname{Im}(g\circ f)\leq\dim\operatorname{Im}g=\operatorname{rank}g$. 如果 f 是满射，那么 $\operatorname{Im}f=W$，所以 $\operatorname{Im}(g\circ f)=\operatorname{Im}g$，因此等号成立. □

这一推论有非常直观的含义：线性映射是同态，因此会丢东西，所以复合映射会丢更多的东西.

§A.3 矩阵

我们已经用用基与坐标表示了线性空间，接下来，我们引入*矩阵*的概念来表示线性映射，我们这一节考虑的线性空间都是有限维的. 考虑一个线性映射 $f:V\to W$，如果 V 的基是 $\{v_1,\dots,v_n\}$，W 的基是 $\{w_1,\dots,w_m\}$，那么 $f(v_i)$ 可以用 $w_1,\dots,w_m$ 的线性组合表示出来，即

$$f(v_i)=a_{1i}w_1+\cdots+a_{mi}w_m.$$

我们把这些系数 a_{ji} 排成如下形状

$$A=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&\cdots&a_{1n}\\a_{21}&a_{22}&\cdots&a_{2n}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\a_{m1}&a_{m2}&\cdots&a_{mn}\end{pmatrix}.$$

此时 A 被称为*矩阵*. $m=n$ 的矩阵被称为*方阵*. $A_i=(a_{i1},\dots,a_{in})$ 被称为矩阵 A 的第 i 行，$A^j=\begin{pmatrix}a_{1j}\\\vdots\\a_{mj}\end{pmatrix}$ 被称为矩阵 A 的第 j 列. 他们分别被叫做*行向量*与*列向量*. 第 i 行第 j 列的元素，也就是 a_{ij}，记为 A_{ij}. 为了节约空间，列向量通常被写成转置的形式，即 $(a_{1j},\dots,a_{mj})^{\mathsf{T}}$. 注意，坐标向量都被视作列向量.

假设在基 v_i 下 $x\in V$ 的坐标是 $X=(x_1,\dots,x_n)^{\mathsf{T}}$. 我们现在来计算 $f(x)$ 在基 w_i 下

的坐标 $Y=(y_1,\dots,y_m)^{\mathsf{T}}$. 因为 $x=x_1v_1+\cdots+x_nv_n$，所以

$$\begin{aligned}f(x)&=f(x_1v_1+\cdots+x_nv_n)\\&=x_1f(v_1)+\cdots+x_nf(v_n)\\&=x_1(a_{11}w_1+\cdots+a_{m1}w_m)+\cdots+x_n(a_{1n}w_1+\cdots+a_{mn}w_m)\\&=(a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n)w_1+\cdots+(a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n)w_m.\end{aligned}$$

因此，$f(x)$ 在基 w_i 下的坐标是 $(a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n,\dots,a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n)^{\mathsf{T}}$，$y_i=a_{i1}x_1+\cdots+a_{in}x_n$. 我们将这一计算结果写作

$$Y=AX.$$

这就是矩阵与向量的乘法.

通过矩阵，线性映射作用在向量上的结果可以被具体算出来. 从这个意义上说，矩阵表示了线性映射. 这一观点可以用下图来表示：

$$\begin{array}{ccc}x & \xmapsto{f} & f(x)\\ \downarrow & & \downarrow\\ X & \xmapsto{A} & Y\end{array}$$

反之，给定一个域 F 上的 $m\times n$ 矩阵 A，我们可以定义一个线性映射 $f_A:F^n\to F^m$：对 $X\in F^n$，$f_A(X)=AX$. f_A 被称为 A 诱导的线性映射. 所以，矩阵本身也可以看成是一个线性映射，不仅仅只是线性映射的表示.

我们看一个平凡的例子. 考虑零映射 $O:x\mapsto 0$. 不管在什么基下，O 的矩阵都是全零矩阵，我们称为零矩阵，依然使用符号 O 表示. 反过来，如果一个线性映射的矩阵是零矩阵，那么这个线性映射也是零映射.

我们再看一个的例子，这个例子说明利用矩阵如何给出不同基之下的坐标变换公式. 设 V 是一个 n 维线性空间，$f:V\to V$ 是一个线性算子. V 的一组基是 $\{v_1,\dots,v_n\}$，另一组基是 $\{v_1',\dots,v_n'\}$. 定义一个 V 的自同构满足 $f(v_i)=v_i'$. 假设 f 在基 $\{v_i\}$ 下的矩阵是 A，这被称为基 $\{v_i\}$ 到基 $\{v_i'\}$ 的过渡矩阵.

考虑一个点 $x\in V$，它在基 $\{v_i\}$ 下的坐标是 $X=(x_1,\dots,x_n)^{\mathsf{T}}$，在基 $\{v_i'\}$ 下的坐标是 $X'=(x_1',\dots,x_n')^{\mathsf{T}}$. 我们来计算 x 在基 $\{v_i'\}$ 下的坐标. 因为 $f(x)=f(x_1v_1+\cdots+x_nv_n)=x_1f(v_1)+\cdots+x_nf(v_n)$，而

$$f(v_i)=v_i'=\sum_{j=1}^{n}a_{ji}v_j,$$

所以

$$f(x)=\sum_{i=1}^{n}x_i\sum_{j=1}^{n}a_{ji}v_j=\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n}a_{ji}x_i\right)v_j\implies$$
$$x=\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n}a_{ji}x_i\right)f^{-1}(v_j)=\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n}a_{ji}x_i\right)v'_j.$$

因此，$X=AX'$.

线性映射相关的概念就可以被迁移到矩阵中来.

首先我们考虑映射的线性组合. 设 V 是 F-线性空间，$f:V\to W$ 和 $g:V\to W$ 是两个线性映射，$\lambda,\mu\in F$，那么 $\lambda f+\mu g$ 也是一个线性映射. 如果 V 的基是 $\{v_1,\dots,v_n\}$，W 的基是 $\{w_1,\dots,w_m\}$. 假设在这些基下，f 和 g 的矩阵分别是 A 和 B，那么 $\lambda f+\mu g$ 的矩阵可以很自然地记作 $\lambda A+\mu B$. 容易验证，$\lambda A+\mu B$ 的第 i 行第 j 列的元素是 $\lambda a_{ij}+\mu b_{ij}$. 用这样的办法，我们就定义了矩阵的*数乘*和*加法*.

然后再考虑映射的复合. 设 V 是 F-线性空间，$f:V\to W$ 和 $g:W\to U$ 是两个线性映射. 如果 V 的基是 $\{v_1,\dots,v_n\}$，W 的基是 $\{w_1,\dots,w_m\}$，U 的基是 $\{u_1,\dots,u_l\}$. 假设在这些基下，g 和 f 的矩阵分别是 A 和 B，那么复合 gf 的矩阵可以很自然地记作 AB. 我们来计算 AB 的第 i 行第 j 列的元素. 因为 $gf(v_i)=g(f(v_i))$，所以

$$\begin{aligned}gf(v_i)&=g(f(v_i))\\&=g(a_{1i}w_1+\cdots+a_{mi}w_m)\\&=a_{1i}g(w_1)+\cdots+a_{mi}g(w_m)\\&=a_{1i}(b_{11}u_1+\cdots+b_{l1}u_l)+\cdots+a_{mi}(b_{1m}u_1+\cdots+b_{lm}u_l)\\&=(a_{1i}b_{11}+\cdots+a_{mi}b_{1m})u_1+\cdots+(a_{1i}b_{l1}+\cdots+a_{mi}b_{lm})u_l.\end{aligned}$$

因此，AB 的第 i 行第 j 列的元素是 $a_{1i}b_{j1}+\cdots+a_{mi}b_{jm}$. 这就是矩阵乘法的定义. 当有多个相同矩阵相乘时，我们可以写成幂的形式. 比如，$A^2=AA$，$A^3=AAA$ 等等.

接下来，我们考虑同构对应的矩阵. 最简单的同构是恒等映射 $\mathrm{id}:V\to V$，它的矩阵是*单位矩阵* I_n. 容易看出，无论在什么基下，I_n 都等于

$$\begin{pmatrix}1&0&\cdots&0\\0&1&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&1\end{pmatrix}.$$

有了单位矩阵，类似算子的多项式，给定多项式 $G(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$，我们可以定义矩阵 $G(A)=a_0I_n+a_1A+\cdots+a_nA^n$.

在更一般的情况下，考虑 V 和 W 是 n 维的 F-线性空间，基分别是 $\{v_1,\dots,v_n\}$ 和 $\{w_1,\dots,w_n\}$. 如果线性映射 $f:V\to W$ 将 v_i 映到 $\lambda_i w_i$，那么 f 的矩阵就是

$$\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n\end{pmatrix}.$$

我们将这样的矩阵称为对角矩阵.

对于一般的同构映射 $f:V\to W$，它有一个同构逆映射 $f^{-1}:W\to V$. 假设 V 的基是 $\{v_1,\dots,v_n\}$，W 的基是 $\{w_1,\dots,w_n\}$，那么 f 和 f^{-1} 的矩阵分别是 A 和 B. 我们来计算 AB 和 BA. 因为 $f^{-1}f=\mathrm{id}$，所以 $AB=I_n$. 同理，$BA=I_n$. B 可以被看成 A 的逆元，我们记作 $B=A^{-1}$. 这就是矩阵的逆的定义.

接下来，我们引入矩阵转置的概念.

定义 A.16 (矩阵转置) 设 $A=(a_{ij})$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，我们定义 A 的**转置**为一个 $n\times m$ 矩阵 $A^{\mathsf{T}}=(a_{ji})$.

实矩阵的转置在线性映射中对应的是对偶空间的对偶映射，这里我们不展开讨论了.

对于满足 $A^{\mathsf{T}}=A$ 的矩阵，我们称之为**对称矩阵**. 对于满足 $A^{\mathsf{T}}=-A$ 的矩阵，我们称之为**反对称矩阵**.

现在，矩阵作为一个代数结构所需要的要素都已经给出了. 我们来看看矩阵的一些基本性质. 这些性质大多是从线性映射继承过来的（命题 A.1），我们在此略去证明.

命题 A.3 设 A,B,C 都是域 F 上的 n 阶方阵，$\lambda,\mu\in F$，那么

1. $(\lambda A+\mu B)C=\lambda AC+\mu BC$;
2. $A(\lambda B+\mu C)=\lambda AB+\mu AC$;
3. $(AB)C=A(BC)$;
4. $A(B+C)=AB+AC$;
5. $(A+B)C=AC+BC$;
6. $AI_n=I_nA=A$;
7. $AO=OA=O$;

8. $A(-B) = (-A)B = A(-B) = -(AB)$;

9. $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$;

10. $(A^{-1})^{-1} = A$;

11. $(\lambda A)^{-1} = \lambda^{-1}A^{-1}$;

12. $(A^{\mathsf{T}})^{-1} = (A^{-1})^{\mathsf{T}}$;

13. $(A^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}} = A$;

14. $(A+B)^{\mathsf{T}} = A^{\mathsf{T}} + B^{\mathsf{T}}$;

15. $(AB)^{\mathsf{T}} = B^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}$;

16. $(\lambda A)^{\mathsf{T}} = \lambda A^{\mathsf{T}}$;

17. $(A^{-1})^{\mathsf{T}} = (A^{\mathsf{T}})^{-1}$;

18. $(A^{\mathsf{T}})^{-1} = (A^{-1})^{\mathsf{T}}$.

回顾前面关于矩阵的表示论观点，从线性映射 f 得到矩阵 A 需要基于给定的基. 一个自然的问题是，如果我们换了基，那么矩阵 A 会怎么变化？下面我们来具体计算.

设 $f : V \to V$ 是一个线性算子，V 的两个基分别是 $\{v_1, \ldots, v_n\}$ 和 $\{v'_1, \ldots, v'_n\}$. 假设在这两个基下，f 的矩阵分别是 $A = (a_{ij})$ 和 $A' = (a'_{ij})$. 我们来计算 A' 和 A 的关系.

假设 g 是一个自同构，使得 $g(v_i) = v'_i$，在 $\{v_1, \ldots, v_n\}$ 下对应的矩阵是 B. 我们下面证明 $A' = B^{-1}AB$，注意到

$$fg(v_i) = f(g(v_i)) = f(v'_i) = \sum_j a'_{ji} v'_j = \sum_j a'_{ji} g(v_j),$$

因为 g 可逆，所以

$$g^{-1}fg(v_i) = \sum_j a'_{ji} v_j.$$

左边是 $B^{-1}AB$，而右边对应的就是 A'. 所以我们证明了

定理 A.5 设 V 是 F-线性空间，$f : V \to V$ 是一个线性算子，$\{v_1, \ldots, v_n\}$ 和 $\{w_1, \ldots, w_n\}$ 是 V 的两个基. 假设 A 和 A' 分别是 f 在这两个基下的矩阵，B 是从 $\{v_1, \ldots, v_n\}$ 到 $\{w_1, \ldots, w_n\}$ 的过渡矩阵，那么 $A' = B^{-1}AB$.

矩阵 A 和 A' 通过可逆矩阵 B 联系了起来：$A' = B^{-1}AB$，行如这样的矩阵关系被称为相似，记作 $A \sim A'$. 容易验证，相似是一个等价关系，也就是说：

- $A \sim A$；
- 如果 $A \sim A'$，那么 $A' \sim A$；
- 如果 $A \sim A'$，$A' \sim A''$，那么 $A \sim A''$.

根据上面的讨论，矩阵的相似关系对应了基的变换：如果我们把 V 的基换成 V 的另一个基，那么线性算子 f 的矩阵也会变成相似的另一个矩阵.

最后，我们讨论矩阵的秩. 同样，这一定义来自线性映射的□秩

定义 A.17 (矩阵的秩，行空间，列空间) 设 A 是一个 $m \times n$ 矩阵，$f_A : F^n \to F^m$ 是它诱导的线性映射.

- 定义 A 的**秩**为 f_A 的秩，记为 $\operatorname{rank} A$.
- A 的 m 个行向量生成了一个线性空间，称为矩阵 A 的**行空间**；类似地，所有的列向量生成了一个线性空间，称为矩阵 A 的**列空间**.
- 行空间的维数称为矩阵 A 的**行秩**，列空间的维数称为矩阵 A 的**列秩**.
- 如果行秩等于 m，即行空间的一组基就是所有行向量，那么我们称 A 是**行满秩**的；如果列秩等于 n，即列空间的一组基就是所有列向量，那么我们称 A 是**列满秩**的.
- 对于方阵来说，如果它同时是行满秩的和列满秩的，那么我们称它是**满秩**的.

矩阵的秩最核心的定理是：

定理 A.6 *设 A 是一个 $m \times n$ 矩阵，A 的行秩、列秩与秩都相等.*

这一定理的证明通常涉及到矩阵的初等行变换，也可以用对偶空间理论的证明，我们这里就不给出了.

从线性映射复合的秩关系（推论 A.2），我们直接得到了矩阵乘法秩的性质：

命题 A.4 *设 A 是一个 $m \times n$ 矩阵，B 是一个 $n \times p$ 矩阵，那么*

$$\operatorname{rank}(AB) \leq \min\{\operatorname{rank} A, \operatorname{rank} B\}.$$

如果 A 和 B 都是方阵，那么当 A 可逆时，$\operatorname{rank}(AB) = \operatorname{rank} B$；当 B 可逆时，$\operatorname{rank}(AB) = \operatorname{rank} A$.

§A.4 双线性型与二次型

本节考虑线性函数的一种推广，即*双线性函数*. 它是两个变量的函数，而且每个变量都是线性的. 这种函数在几何上有很多应用，比如内积. 我们先来给出它的定义.

定义 A.18 (双线性型) 设 V 是一个 F-线性空间，如果 V 上有一个映射 $f : V \times V \to F$，满足

1. 对于任意的 $v \in V$，$f(v, \cdot) : V \to F$ 是一个线性映射；
2. 对于任意的 $w \in V$，$f(\cdot, w) : V \to F$ 是一个线性映射.

那么称 f 是 V 上的一个**双线性型**.

类似线性映射，我们的首要任务是表示一个双线性型. 实际上，双线性型也可以用矩阵来表示. 选定一组 V 的基 $\{v_1, \dots, v_n\}$，任意给定两个向量 $x = \sum_{i=1}^n x_i v_i$ 和 $y = \sum_{i=1}^n y_i v_i$，我们有

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f\left(\sum_{i=1}^n x_i v_i, \sum_{j=1}^n y_j v_j\right) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i y_j f(v_i, v_j). \end{aligned}$$

如果我们知道了 $f(v_i, v_j)$，那么 $f(x, y)$ 就完全可以用 x, y 的坐标表示出来. 这就是说，我们可以用矩阵来表示双线性型. 定义 $A_{ij} = f(v_i, v_j)$，我们将矩阵 $A = (A_{ij})$ 称为 f 在基 $\{v_1, \dots, v_n\}$ 下的*矩阵*. 假设 x, y 的坐标是 X, Y，那么我们有

$$f(x, y) = X^{\mathsf{T}} A Y.$$

反过来，如果给定了一个 n 阶方阵 A，那么我们可以定义一个双线性型 f_A，使得 $f_A(v_i, v_j) = a_{ij}$，这样的双线性型称为*由矩阵 A 诱导的双线性型*. 于是，双线性型就和矩阵一一对应了.

类似线性映射，双线性映射关心的一个重要问题是基变换. 设 A 是一个双线性型 f 在基 $\{v_1, \dots, v_n\}$ 下的矩阵，而 A' 是基 $\{v'_1, \dots, v'_n\}$ 下的矩阵，假设 $\{v_i\}$ 到 $\{v'_i\}$ 的过渡矩阵是 P. 现在任取 $x, y \in V$，他们在基 $\{v_i\}$ 下的坐标分别是 X, Y，在基 $\{v'_i\}$ 下的坐标分别是 X', Y'，那么我们有

$$f(x, y) = X^{\mathsf{T}} A Y = X'^{\mathsf{T}} A' Y'.$$

根据坐标的基变换公式，$X = PX'$，$Y = PY'$，所以

$$X^{\mathsf{T}}AY = (AX')^{\mathsf{T}}P(AY') = X'^{\mathsf{T}}(A^{\mathsf{T}}PA)Y'.$$

由于 x, y 是任意的，X, Y 也是任意的，联立上面两式，$A' = A^{\mathsf{T}}PA$，这就是基变换公式. 对应到矩阵中，这被称为合同变换.

定义 A.19 (合同矩阵) 设 A, B 都是 n 阶方阵，如果存在一个可逆方阵 P，使得 $B = P^{\mathsf{T}}AP$，那么称 A 和 B 是**合同的**.

容易验证，合同关系是一个等价关系，这与相似关系是类似的. 根据命题 A.4，可逆矩阵相乘不改变矩阵的秩，所以合同矩阵的秩是相同的. 于是，双线性型的任意矩阵表示都有相同的秩，我们因此可以定义双线性型的秩：

定义 A.20 (双线性型的秩) 设 f 是 V 上的一个双线性型，如果 f 在某个基下的矩阵的秩是 r，那么称 f 的**秩**是 r.

接下来，我们考虑一种特殊的双线性型：对称双线性型，即 $f(x, y) = f(y, x)$ 对任意 $x, y \in V$ 成立. 注意到，对称双线性型对应的矩阵是对称矩阵. 我们现在令 $x = y$，定义 $q(x) = f(x, x)$，那么 q 是一个实值函数，这样的函数便是二次型.

定义 A.21 (二次型) 设 V 是数域 F 上的线性空间，f 是 V 上的一个对称双线性型，那么定义 $q : V \to F$ 为 $q(x) = f(x, x)$，称 q 是 f 诱导的**二次型**.

自然，秩的概念也可以被迁移到二次型上：

定义 A.22 (二次型的秩) 设 q 是 V 上的一个二次型，如果定义 q 的**秩**为诱导它的双线性型 f 的秩.

实际上，二次型本身也可以算出双线性型：设 q 是二次型，那么我们可以定义

$$f(x, y) = \frac{1}{2}(q(x + y) - q(x) - q(y)).$$

容易验证，f 是一个对称双线性型. 于是，二次型和对称双线性型是一一对应的.

自然，二次型也可以用坐标表示. 选定一组基，假设二次型 q 对应的对称双线性型是 f，那么 q 在这组基下的矩阵就是 f 在这组基下的矩阵. 这样，二次型就和对称矩阵一一对应了. 如果再给定 $x \in V$ 的坐标 X，那么 $q(x) = X^{\mathsf{T}}AX$. 如果把它展开写，就是

$$q(x) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j.$$

这是一个关于 x_i 的二次函数. 通常来说，我们希望化简这一表示，如果能写成 $\sum_{i=1}^{n} a_{ii}x_i^2$ 的形式，那么计算都会变得非常容易. 此时，二次型 q 的矩阵是对角矩阵.

定义 A.23 (规范型) 设 V 是数域 F 上的线性空间，q 是 V 上的一个二次型，如果存在一组基，使得 q 在这组基下的矩阵是对角矩阵，那么称这个对角矩阵是 q 的**规范型**，这组基是**规范基**.

二次型的一个核心定理是，规范型总是存在：

定理 A.7 *设 V 是 F-线性空间，q 是 V 上的一个二次型，那么 q 存在规范型.*

证明. 首先，选定一组基 $\{v_1, \dots, v_n\}$，保证 $q(v_1) \neq 0$（这样的 v_1 一定存在，否则 q 就是零映射，自然有规范型）我们想办法把它变成另外一组基，使得二次型 q 的矩阵是对角矩阵. 假设 q 对应的双线性型是 f. 对维数 n 用归纳法.

如果 $n = 1$，这是显然的.

现在考虑一般的 n，我们想办法将矩阵的第一行和第一列非对角的元素都变成 0，那么剩下的矩阵实际上就是在一个 $n-1$ 维空间上的双线性型，于是就可以用归纳假设了. 注意到这些元素其实就是 $f(v_1, v_j)$，所以只需要把他们变成 0 就可以了.

注意到 $f(v_1, \cdot)$ 是非零线性函数，秩是 1，所以 $\dim \ker f(v_1, \cdot) = n - 1$，于是我们选出核的基 $v_2', \dots, v_n'$. 另外 $v_1 \notin \ker f(v_1, \cdot)$，所以 v_1 与 $\{v_2', \dots, v_n'\}$ 线性无关，于是 $\{v_1, v_2', \dots, v_n'\}$ 是一组基. 根据核的定义，此时 $f(v_1, v_i') = 0$，因此这样就把第一行非对角的元素都变成了 0. □

相应地，在矩阵上，这一定理的表述为：

推论 A.3 *任何对称矩阵 A 都合同于一个对角矩阵.*

在实数域上，这一定理还可以被加强：

定理 A.8 (惯性定理) *设 V 是 $\mathbb{R}$ 上的 n 维线性空间，q 是 V 上的一个二次型，那么 q 存在形如*

$$q(x) = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i x_i^2$$

的规范型（(x_i) 是 x 的坐标），其中 $\lambda_i \in \{1, -1\}$，r 是 q 的秩，且 λ_i 中 1 的个数和 -1 的个数只依赖于 q，不依赖于规范基的选取.

这一定理我们就不再给出证明了.

惯性定理给出了几类特殊的二次型：

定义 A.24 (正定，半正定，负定，半负定) 设 V 是 $\mathbb{R}$ 上的 n 维线性空间，q 是 V 上的一个二次型.

- 如果 q 的规范型是

$$q(x) = \sum_{i=1}^{n} x_i^2,$$

那么称 q 是**正定**的.

- 如果 q 的规范型是

$$q(x) = \sum_{i=1}^{r} x_i^2 \quad (r \leq n),$$

那么称 q 是**半正定**的.

- 如果 q 的规范型是

$$q(x) = -\sum_{i=1}^{r} x_i^2,$$

那么称 q 是**负定**的.

- 如果 q 的规范型是

$$q(x) = -\sum_{i=1}^{r} x_i^2 \quad (r \leq n),$$

那么称 q 是**半负定**的.

对于实对称矩阵 A，如果它对应的二次型是正定/半正定/负定/半负定的，那么称 A 是**正定/半正定/负定/半负定**的.

以上概念都可以直接用二次型的取值去等价定义：

命题 A.5 *设 V 是 $\mathbb{R}$ 上的 n 维线性空间，q 是 V 上的一个二次型.*

- *q 是**正定**的当且仅当对任意的非零向量 $x \in V$，都有 $q(x) > 0$.*
- *q 是**半正定**的当且仅当对任意的非零向量 $x \in V$，都有 $q(x) \geq 0$.*
- *q 是**负定**的当且仅当对任意的非零向量 $x \in V$，都有 $q(x) < 0$.*
- *q 是**半负定**的当且仅当对任意的非零向量 $x \in V$，都有 $q(x) \leq 0$.*

证明. 选定一组规范基，按照定义验证即可. □

自然，这一命题的矩阵版本也是成立的. 一个直接的推论是：

推论 A.4 *设 A 是一个矩阵，那么 $A^{\mathsf{T}}A$ 和 AA^{T} 都是半正定的. 此外，B 是一个正定矩阵当且仅当存在可逆矩阵 P，使得 $B = P^{\mathsf{T}}P$.*

§A.5 带内积的线性空间

内积的考虑是从几何中来的. 一个典型的例子是平面欧氏几何. 我们知道，笛卡尔的平面解析几何等价于平面欧氏几何. 建立坐标系的过程实际上就是选定了一个基，而坐标就是基的坐标. 在这个基下，平面上的点可以用坐标表示. 然而，并不是所有的坐标轴都是好计算的，我们考虑的是互相垂直的坐标轴，此时，平面上点的坐标就完全可以用投影来表示了. 计算投影的过程实际上就是内积的过程. 将平面解析几何的内积定义一般化，我们就得到了线性空间的内积.

定义 A.25 (内积) 设 V 是一个实线性空间，如果 V 上有一个对称双线性型 $\langle\cdot,\cdot\rangle : V \times V \to F$，它诱导的二次型是正定的，那么称 $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 是 V 上的一个**内积**，称 V 是一个**内积空间**.

注意，讨论内积的时候，我们只考虑实线性空间，这是因为实数可以比大小，并且不会像有理数那样对根号不封闭，所以可以定义模长. 自然，$\mathbb{R}^n$ 是内积空间，因为我们可以定义 $\langle x, y\rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i$.

利用内积，我们可以定义模长.

定义 A.26 (模) 设 V 是一个内积空间，$v \in V$，定义 v 的**模**或内积诱导的**范数**为 $\|v\| = \sqrt{\langle v, v\rangle}$.

容易证明，向量的模等于零当且仅当它是零向量，此外，对任意的 $v \in V$ 和 $\lambda \in \mathbb{R}$，有 $\|\lambda v\| = |\lambda| \, \|v\|$. 模长为 1 的向量称为**单位向量**.

反过来，内积诱导的范数也可以表示内积：

$$\langle v, w\rangle = \frac{1}{4}\left(\|v+w\|^2 - \|v-w\|^2\right). \tag{A.1}$$

利用内积，我们可以推广平面几何中的各种概念. 首先是垂直的概念.

定义 A.27 (正交) 设 V 是一个内积空间，$v, w \in V$，如果 $\langle v, w\rangle = 0$，那么称 v 与 w **正交**，记作 $v \perp w$.

对于一般情况，两个向量会有夹角的概念，我们可以利用内积来定义.

定义 A.28 (夹角) 设 V 是一个内积空间，$v, w \in V$，如果 $\theta \in [0, \pi]$ 满足

$$\cos\theta = \frac{\langle v, w\rangle}{\|v\| \, \|w\|},$$

那么称 θ 是 v 与 w 的**夹角**.

夹角对任意非零向量都可以定义，这是因为内积有 Cauchy 不等式：

定理 A.9 (Cauchy 不等式) *设 V 是一个内积空间，$v, w \in V$，那么有*

$$|\langle v, w\rangle| \leq \|v\| \|w\|.$$

证明. 取 $\lambda \in \mathbb{R}$，那么

$$0 \leq \langle v + \lambda w, v + \lambda w\rangle = \|v\|^2 + 2\lambda \langle v, w\rangle + \lambda^2 \|w\|^2.$$

将最右边看作是 λ 的函数，这是一个二次函数，因为它恒大于等于 0，所以判别式 $\Delta \leq 0$，即

$$4\langle v, w\rangle^2 - 4\|v\|^2\|w\|^2 \leq 0 \iff |\langle v, w\rangle| \leq \|v\| \|w\|. \qquad \square$$

利用 Cauchy 不等式，我们可以证明模长满足三角不等式：

定理 A.10 (三角不等式) *设 V 是一个内积空间，$v, w \in V$，那么有*

$$\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\|.$$

证明. 由 Cauchy 不等式，我们有

$$\begin{aligned}\|v + w\|^2 &= \langle v + w, v + w\rangle \\ &= \|v\|^2 + 2\langle v, w\rangle + \|w\|^2 \\ &\leq \|v\|^2 + 2\|v\|\|w\| + \|w\|^2 \\ &= (\|v\| + \|w\|)^2.\end{aligned} \qquad \square$$

利用以上性质，容易验证，模实际上给了 V 一个*范数*. 关于范数的详细讨论，见附录 B.1.1. 对于一般的范数，我们无法像 (A.1) 一样去定义内积，所以内积有它独特的性质.

内积还给出了*投影*的概念：

定义 A.29 (投影) 设 V 是一个内积空间，$v, w \in V$，如果 $\lambda \in \mathbb{R}$ 满足 $\langle v - \lambda w, w\rangle = 0$，那么称 λw 是 v 在 w 上的**投影**，其中 $\lambda = \langle v, w\rangle / \|w\|^2$.

接下来，我们继续表示论的观点，讨论内积空间中的基与坐标. 首先是正交与线性无关的关系.

命题 A.6 *设 V 是一个内积空间，两两正交的非零向量 $v_1, \cdots, v_n \in V$ 是线性无关的.*

证明. 设 $\lambda_1, \cdots, \lambda_n \in \mathbb{R}$ 满足 $\sum_{i=1}^n \lambda_i v_i = 0$，那么

$$0 = \left\langle \sum_{i=1}^n \lambda_i v_i, v_j \right\rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i \langle v_i, v_j \rangle = \lambda_j \left\| v_j \right\|^2.$$

因为 $v_j \neq 0$，所以 $\lambda_j = 0$，这就证明了线性无关性. □

两两正交的基被称为**正交基**，如果正交基的每个向量都是单位向量，那么称为**标准正交基**. 在内积空间中，基存在性定理（定理 A.1）可以被加强为标准正交基存在性定理：

定理 A.11 (标准正交基存在性定理) *设 V 是一个有限维内积空间，那么 V 中存在一个标准正交基.*

我们只提示这一定理的证明思路. 首先选择一个基，然后利用 Gram-Schmidt 正交化方法将它正交化，再将它单位化.

我们来看看这一定理的用处. 首先，它给出了计算坐标的简易方式.

命题 A.7 *设 V 是一个内积空间，它的标准正交基是 $e_1, \cdots, e_n$，$v \in V$，那么*

$$v = \sum_{i=1}^n \langle v, e_i \rangle e_i.$$

另外，成立勾股定理：

$$\|v\|^2 = \sum_{i=1}^n \langle v, e_i \rangle^2.$$

在标准正交基下，投影的系数就是坐标. 此时，内积也可以被写成矩阵的形式. 假设 $x, y \in V$，他们的坐标分别是 X 和 Y，那么 $\langle x, y \rangle = X^\mathsf{T} Y$.

使用标准正交基的另一个好处是，线性函数的表示变得简单了. 给定 V 的一个标准正交基 $\{e_i\}_{i=1}^n$ 和 V 上的线性函数 f，对任意一个向量 $v = \sum_{i=1}^n v_i e_i$，

$$f(v) = \sum_{i=1}^n v_i f(e_i).$$

考虑向量 $e_f = \sum_{i=1}^n f(e_i) e_i$，容易验证 $f(v) = \langle e_f, v \rangle$.

另一方面，这样的 e_f 必定是唯一的. 如果有两个 e_f, e_f' 使得 $\langle e_f, v \rangle = \left\langle e_f', v \right\rangle = f(v)$ 对任意的 v 都成立，那么取 $v = e_f - e_f'$ 得

$$\left\langle e_f - e_f', e_f - e_f' \right\rangle = 0 \iff e_f - e_f' = 0.$$

综上，我们可以用一个向量的内积来表示线性函数：

定理 A.12 (Riesz 表示定理) *设 V 是一个内积空间，f 是 V 上的一个线性函数，那么存在唯一的向量 $u \in V$，使得 $f(v) = \langle u, v \rangle$ 对任意的 $v \in V$ 成立.*

反之，给定一个向量 u，很容易验证，$f_u(\cdot) = \langle u, \cdot \rangle$ 就是一个线性函数. 如此我们就给出了内积空间中的线性函数和向量的一一对应.

此外，利用标准正交基，内积空间中一组向量的线性无关性也可以用内积来判断，这就是 *Gram* 矩阵.

定义 A.30 (Gram 矩阵) 给定内积空间 V 的一组向量 $v_1, \ldots, v_k$，定义他们的 **Gram 矩阵** 为 $G = (\langle v_i, v_j \rangle)_{k \times k}$.

利用标准正交基，很容易计算 Gram 矩阵. 我们其实已经见过这样的例子. 给定任意一个实矩阵 A，$A^\mathsf{T} A$ 就是列向量的 Gram 矩阵，AA^T 就是行向量的 Gram 矩阵.

Gram 矩阵的基本性质是：

命题 A.8 *设 V 是一个内积空间，$v_1, \ldots, v_k \in V$，他们的 Gram 矩阵为 G，那么*

1. *G 是对称矩阵；*
2. *G 是半正定的；*
3. *$v_1, \ldots, v_k$ 线性无关当且仅当 G 正定.*

证明. 1. 显然.

2. 考虑 $\mathbb{R}^k$ 上的二次型 $f(x) = x^\mathsf{T} G x$. 对任意的 $x \in \mathbb{R}^k$，有

$$x^\mathsf{T} G x = \sum_{i,j=1}^{k} x_i x_j \langle v_i, v_j \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^{k} x_i v_i, \sum_{j=1}^{k} x_j v_j \right\rangle = \left\| \sum_{i=1}^{k} x_i v_i \right\|^2 \geq 0.$$

   因此 G 是半正定的.

3. 我们已经证明 $f(x) \geq 0$. 由命题 A.5，G 是正定的当且仅当等价式 $f(x) = 0 \iff x = 0$ 成立. 而 $f(x) = \left\| \sum_{i=1}^{k} x_i v_i \right\|^2$，因此 $f(x) = 0 \iff \sum_{i=1}^{k} x_i v_i = 0$，所以 $x = 0 \iff v_1, \ldots, v_k$ 线性无关. □

利用第三点，我们可以很容易地判断一组向量的线性无关性.

半正定和对称性还暗示着，G 可以形成某种半正定的二次型. 我们在证明中已经给出这样的二次型 f. 在附录 C.3.3，我们会遇到这样的例子，即一族随机变量的协方差矩阵.

向量组之间的正交性也可以用 Gram 矩阵来刻画：

命题 A.9 设 V 是一个内积空间，$v_1,\dots,v_k \in V$，那么下列命题等价：

1. $v_1,\dots,v_k$ 两两正交；
2. G 是对角矩阵.

特别地，$v_1,\dots,v_k$ 是标准正交的当且仅当 $G = I_k$.

这一命题的证明是显然的.

内积空间中，直和分解也可以被加强. 为此，我们先引入正交补的概念.

定义 A.31 (正交补) 设 V 是一个内积空间，$W \subseteq V$，那么 W 的**正交补**是

$$W^{\perp} = \{v \in V : \forall w \in W, \langle v, w\rangle = 0\}.$$

定理 A.13 设 V 是一个内积空间，$W \subset V$ 是一个有限维子空间，那么

$$V = W \oplus W^{\perp}, \quad (W^{\perp})^{\perp} = W.$$

这一定理的证明思路类似定理 A.4 的证明，区别是这里需要扩充标准正交基. 这里不再给出具体证明.

最后，我们考虑标准正交基之间的过渡矩阵. 设 V 是一个内积空间，$e_1,\cdots,e_n$ 和 $e'_1,\cdots,e'_n$ 都是 V 的标准正交基. 设 $e'_j = a_{1j}e_1 + \cdots + a_{nj}e_n$，如此就得到了过渡矩阵 A. 我们来看看 A 的性质.

命题 A.10 设 V 是一个内积空间，$e_1,\cdots,e_n$ 和 $e'_1,\cdots,e'_n$ 都是 V 的标准正交基. 设 e_i 到 e'_i 的过渡矩阵是 A，那么 $AA^{\mathsf{T}} = A^{\mathsf{T}}A = I_n$.

证明. 设 $A = (a_{ij})$，那么

$$\begin{aligned}\left\langle e'_i, e'_j \right\rangle &= \left\langle \sum_{k=1}^{n} a_{ki}e_k, \sum_{l=1}^{n} a_{lj}e_l \right\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} a_{ki}a_{lj}\langle e_k, e_l\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{n} a_{ki}a_{kj}.\end{aligned}$$

当 $i = j$，上式就是 $\sum_{k=1}^{n} a_{ki}^2 = 1$，当 $i \neq j$，上式就是 $\sum_{k=1}^{n} a_{ki}a_{kj} = 0$. 这就证明了 $AA^{\mathsf{T}} = I_n$. 同理可证 $A^{\mathsf{T}}A = I_n$. □

我们将满足 $A^{\mathsf{T}}A = AA^{\mathsf{T}} = I_n$ 的矩阵称为**正交矩阵**，它的逆矩阵就是它的转置矩阵.

正交矩阵有很多等价的刻画：

定理 A.14 设 A 是一个 n 阶方阵. 下列陈述等价：

1. A 是一个正交矩阵.
2. 对任意 $v \in \mathbb{R}^n$，都有 $\|Av\| = \|v\|$.
3. A 的行向量是两两正交的单位向量.
4. A 的列向量是两两正交的单位向量.
5. $A^{\mathsf{T}} = A^{-1}$.

证明. 按照定义写出即可. □

利用基变换，我们马上可以得到以下正交矩阵的性质：

命题 A.11 设 A, B 是 n 阶正交矩阵，那么

1. I_n 是正交矩阵；
2. AB 是正交矩阵；
3. A^{-1} 是正交矩阵；

这些性质使得正交矩阵构成了一个群，称为**正交群**，记作 $O(n)$. 这超出了本书的范围，我们就不继续深入了.

接下来，我们讨论内积空间的同构.

定义 A.32 (等距映射与等距同构) 设 V 和 W 都是内积空间，$T : V \to W$ 是一个线性映射，如果对任意的 $v_1, v_2 \in V$，都有 $\langle Tv_1, Tv_2\rangle = \langle v_1, v_2\rangle$，那么称 T 是一个**等距映射**. 如果 T 是一个双射，那么称 T 是一个**等距同构**.

内积空间的同构是线性空间同构的加强版，因为它还要求保持内积.

同样，内积空间的等距同构类只取决于维数；

定理 A.15 设 V 和 W 都是有限维内积空间，那么 V 与 W 等距同构当且仅当 $\dim V = \dim W$.

证明. 证明完全类似定理 A.3 的证明，此时将 V 的标准正交基一一对应到 W 的标准正交基上. □

等距同构对应的矩阵恰好就是正交矩阵.

定理 A.16 *设 V 和 W 都是有限维内积空间，$f: V \to W$ 是一个等距同构，那么在 V 和 W 的标准正交基之下 f 是一个正交矩阵. 反之，n 阶正交矩阵 A 诱导的线性映射 $f_A: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 是一个等距同构.*

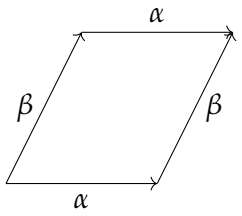
证明. 后半部分（“反之”之后）由定理 A.14 的第二点直接得出. 我们来证明前半部分.

设 $v_1, \cdots, v_n$ 是 V 的标准正交基，$w_1, \cdots, w_n$ 是 W 的标准正交基，A 是 f 在这两组基下的矩阵. 考虑任意一个点 $x \in V$，它的坐标是 X. 那么 $f(x)$ 的坐标是 AX. 由于 f 是等距同构，所以 $\|f(x)\| = \|x\|$，根据命题 A.7，这等价于 $\|AX\| = \|X\|$，由定理 A.14 的第二点，A 是一个正交矩阵. □

§A.6 行列式

行列式可以进一步理解为矩阵的表示：将很多个数的矩阵压缩到一个数. 我们将会从几何观点讨论，先从平面开始.

考虑平面 $\mathbb{R}^2$ 上的两个向量 $\alpha = (a_1, a_2)^\mathsf{T}$ 和 $\beta = (b_1, b_2)^\mathsf{T}$，我们可以用这两个向量作为平行四边形的两条边，构造一个平行四边形：



现在我们定义这个平行四边形的*有向面积*. 数值上，有向面积就是我们通常理解的平行四边形面积. 有向面积的符号按照如下的规则给出. 从 α 旋转到 β 所在的方向，转动一个平角以内的角度. 如果这个角度是逆时针的，面积就是正的，否则就是负的.

容易算出，这个有向面积是 $a_1b_2 - a_2b_1$，可以使用如下形象的记号表示：

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \alpha & \beta \end{vmatrix}.$$

我们可以把这个面积的计算推广到 n 维空间中去. 设 A 是一个 n 阶方阵，它的列向量是 $A^1, \cdots, A^n$，我们考虑这些列向量张成的 n 维平行体：

$$\Pi(A) = \left\{ x_1 A^1 + \cdots + x_n A^n : 0 \leq x_i \leq 1 \right\}.$$

平行体的体积可以归纳定义. 一维的情况下，向量就是实数，这个实数的绝对值就作为体积. 假设已经定义了 $n-1$ 维平行体的体积，那么 n 维平行体的体积就是它的底的体积乘以高. 我们需要定义什么是底什么是高. 底是 $n-1$ 维平行体 $\Pi(A^1, \ldots, A^{n-1})$. 为定义高，先将 A^n 投影到 $\mathrm{Span}(A^1, \ldots, A^{n-1})$，投影 A^n_* 就是垂足，高就是 $A^n - A^n_*$ 的长度. 这样，我们就得到了 n 维平行体的体积的定义.

行列式与有向体积有关. 我们这里不会专门定义有向体积的概念，只给出一个二维情况下的直观. 通常 $\mathbb{R}^2$ 的标准正交基 e_1, e_2，从 e_1 到 e_2 是逆时针的. 我们之前定义有向面积的时候也遵循了这样的原则：与 e_1, e_2 形成相同定向（即顺逆时针）的面积是正的，与 e_1, e_2 形成相反定向的面积是负的. 定向这一概念本质地反映了一组向量的顺序.

对于一般情况，向量 $A^1, \cdots, A^n$ 和 $\mathbb{R}^n$ 的标准正交基 $e_1, \cdots, e_n$ 之间同定向时 $\Pi(A)$ 的体积是正的，否则就是负的. 这样，我们就定义了有向体积. 我们指出，行列式的定义恰好就给出了有向体积的计算公式. 下面我们给出行列式的定义.

定义 A.33 (行列式) 设 A 是一个 n 阶方阵，A 的行列式 $\det A$ 归纳定义为

1. $n = 1$ 时，$\det A = A_{11}$；
2. $\det A = A_{11} \det R_{11} - A_{12} \det R_{12} + \cdots + (-1)^{1+n} A_{1n} \det R_{1n}$，其中 R_{ij} 是 A 是 A 去掉第 i 行第 j 列以后得到的矩阵.

下面仅罗列一些行列式的性质，但不给出证明.

命题 A.12 *设 A, B 是两个 n 阶方阵，则*

1. $\det I_n = 1$；
2. $\det(AB) = (\det A)(\det B)$；
3. $\det(\lambda A) = \lambda^n \det A$；
4. $\det(A^{-1}) = (\det A)^{-1}$；
5. $\det A = 0$ *当且仅当* A *不可逆*；
6. $\det(A^\mathsf{T}) = \det A$；

矩阵的行列式自然地定义了线性算子的行列式. 这一定义是良定义的，因为根据定理 A.5，如果 A 和 A' 是同一个线性算子在不同基下的矩阵，由过渡矩阵 B 给出，那么 $A' = B^{-1}AB$，因此根据命题 A.12，

$$\det A' = \det(B^{-1}AB) = (\det B^{-1})(\det A)(\det B) = (\det B^{-1})(\det B)(\det A) = \det A.$$

因而行列式也是刻画线性算子的一个不变量.

定义 A.34 (线性算子的行列式) 设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个线性算子，A 是 f 在 V 的一个基下的矩阵，则 f **的行列式** $\det f$ 定义为 $\det A$.

线性算子的行列式表明了行列式的几何意义. 一个线性算子将一个平行体每条边（也就是基向量）映射到另一个平行体的每条边，如此就将一个平行体映射到了另一个. 原来平行体的体积在这个线性算子作用后会发生改变，这个变化的比率就是行列式.

具体来说，我们选择 V 的标准正交基 $e_1, \dots, e_n$，他们的坐标是 $E_1, \dots, E_n$. 考虑线性算子 f，它对应的矩阵是 A. 现在考虑单位立方体（自然也是平行体）$\Pi(e_1, \dots, e_n)$，那么在映射作用下平行体的边就变成了 $\Pi(f(e_1), \dots, f(e_n))$. 因为是 $\{e_i\}$ 是标准正交基，所以这些平行体实际上也可以写作 $\Pi(E_1, \dots, E_n)$ 和 $\Pi(AE_1, \dots, AE_n)$，注意到，后者实际上就是 $\Pi(A^1, \dots, A^n)$，考虑他们的有向体积，这正好是行列式的定义.

作为一个注记，从线性算子的角度来看，行列式的性质（命题 A.12）就是非常自然的结果了. 我们将矩阵对应的线性映射写出. 那么，除了最后一条，命题 A.12 的性质都可以逐一解释：

1. 恒等算子不改变有向体积，所以行列式为 1；
2. 两个算子 f_A 和 f_B 的复合对有向体积的改变是累乘，即先按比例 $\det f_A$ 变，再按比例 $\det f_B$ 变，因此矩阵乘积的行列式等于行列式的乘积；
3. λA 对应的算子就是 A 算子作用后再按照 λ 的比率等比例伸缩，对于一个 n 维图形来说，这样的变化对有向体积的改变是 λ^n；
4. 考虑可逆线性算子 f，那么，先作用 f 再作用 f^{-1}，体积不变，所以他们对体积变化的比率乘起来 1，即逆的行列式等于行列式的逆；
5. 最后，如果线性算子不可逆，那么像是更低维的，比如在三维空间中的二维平面，那么显然有向体积就是 0 了，所以不可逆的行列式为 0.

行列式还有其他的一些性质，这里不再讨论.

§A.7 算子范数与谱理论

本节讨论如何给算子定义范数，以及如何利用范数来研究算子的性质，特别是特征值相关的性质. 本节需要一些点集拓扑的知识，请参阅附录 B.1.

考虑一个 n 维内积空间 V 以及其上的一个线性算子 f. 给定一个 V 的标准正交基 $e_1,\dots,e_n$，我们可以用矩阵 A 来表示 f. 注意到对任意一个 $x \in V$，假设它的坐标是 $X = (x_1,\dots,x_n)^{\mathsf{T}}$，那么

$$\begin{aligned}\|f(x)\|^2 &= \|AX\|^2 \\ &= \left(\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{i=1}^{n} a_{ij}\right)x_j\right)^2 \\ &\le \max_k \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}|^2 \cdot \sum_{j=1}^{n} x_j^2 \\ &= C\,\|X\| = C\,\|x\|\,.\end{aligned}$$

这里 $C = \max_k \sum_{i=1}^{n} |a_{ik}|^2$，这说明，对给定的算子 f，我们可以找到一个常数 C 使得 $\|f(x)\| \le C\,\|x\|$ 对任意的 $x \in V$ 都成立，因此，我们可以定义算子 f 的范数为最小的这样的常数 C.

定义 A.35 (算子范数) 设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个线性算子，那么 f 的范数定义为

$$\|f\| = \inf\{C \ge 0 : \|f(x)\| \le C\,\|x\|, \forall x \in V\}\,.$$

或者等价地，

$$\|f\| = \sup_{x\in V} \frac{\|f(x)\|}{\|x\|} = \sup_{\|x\|=1} \|f(x)\|\,.$$

要保证定义出来的确实是范数，我们需要验证它满足非负性、齐次性和三角不等式. 我们只证明三角不等式，其他两个类似. 考虑两个算子 f, g，

$$\begin{aligned}\|f+g\| &= \sup_{\|x\|=1} \|(f+g)(x)\| \\ &= \sup_{\|x\|=1} \|f(x)+g(x)\| \\ &\le \sup_{\|x\|=1} (\|f(x)\| + \|g(x)\|) \\ &\le \sup_{\|x\|=1} \|f(x)\| + \sup_{\|x\|=1} \|g(x)\| \\ &= \|f\| + \|g\|\,.\end{aligned}$$

这里我们用到了 V 中向量的三角不等式.

需要注意的是，我们这里定义的算子范数是非常受限的一个定义：我们只考虑了有限维内积空间，由内积诱导的范数定义的算子范数. 一般地，任意两个线性赋范空间之间的线性映射都可以定义范数：

定义 A.36 (线性映射的范数) 设 V, W 是两个线性赋范空间，f 是 V 到 W 的一个线性映射，如果

$$\|f\| = \sup_{\|x\|=1} \|f(x)\|$$

不是无穷大，那么称 f 是**有界**的，$\|f\|$ 是 f 的**算子范数**.

如果线性映射的定义域是有限维空间，那么范数一定存在. 无限维内积空间中算子范数不一定存在，所以我们接下来的讨论都默认有限维线性空间.

注意到，算子范数自然地诱导了矩阵的范数：

定义 A.37 (矩阵范数) 设 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵，那么 A 的范数定义为

$$\|A\| = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|.$$

给定标准正交基底，利用矩阵 A 表示线性映射 f. 假设此时 x 的坐标是 X，那么 $\|f(x)\| = \|AX\|$，由例 B.6、命题 B.10 和推论 B.2，$\|AX\|$ 是 X 的连续函数，因此在紧集 $\{X : \|X\| = 1\}$ 上取到最大值. 因此定义中的 sup 实际上是一个 max. 这一结论对任意范数定义的算子范数都成立（而不仅仅只是内积诱导的范数）. 我们后面会利用内积的特性显式给出取到最大值的向量.

算子范数一个显然的性质是：

命题 A.13 *对有限维内积空间 V 中的线性算子 f，$\|f(x)\| \leq \|f\| \|x\|$ 对任意 $x \in V$ 成立.*

利用这一条，我们马上得到

命题 A.14 *对有限维内积空间 V 中的线性算子 f, g，$\|f \circ g\| \leq \|f\| \|g\|$.*

命题 A.15 *对有限维内积空间 V 中的线性算子 f，$\left\|f^k\right\| \leq \|f\|^k$，这里 f^k 表示 f 的 k 次复合.*

以上性质都可以迁移到一般的线性映射以及矩阵上，这里不再赘述.

上面的性质并不依赖于“内积”的性质，主要是依赖“范数”的性质. 接下来，我们将深入利用内积的性质来研究算子的性质. 这里面的关键概念是*谱*，或者*特征值*.

定义 A.38 (特征值，特征向量，谱) 设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个线性算子，$\lambda \in \mathbb{R}$. 如果存在一个非零向量 $x \in V$ 使得 $f(x) = \lambda x$，那么称 λ 是 f 的一个**特征值**，x 是 λ 对应的**特征向量**. f 的所有特征值的集合称为 f 的**谱**，记作 $\sigma(f)$.

我们这里限制特征值为实数. 实际上，一般的情况下，特征值应该为复数，而内积应该定义为复共轭定义的内积. 但是，我们不关心会出现复数的情况，因此这里只考虑实数的情况.

我们下面的任务是给出特征值的刻画. 首先定义特征子空间：

定义 A.39 (特征子空间) 设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个线性算子，$\lambda \in \mathbb{R}$. 定义

$$V^\lambda = \{x \in V : f(x) = \lambda x\}.$$

称 V^λ 是 f 的**特征子空间**.

显然，V^λ 是 V 的一个线性子空间. 我们下面的任务是刻画特征子空间.

特征向量存在的意味着 V^λ 非零，也就是 $\ker(f - \lambda \cdot \mathrm{id}) \neq \{0\}$. 因此，根据推论 A.1，$f - \lambda \cdot \mathrm{id}$ 不是满射，因此也不是双射，从而 $\det(f - \lambda \cdot \mathrm{id}) = 0$. 当选择一组基之后，$\det(f - \lambda \cdot \mathrm{id})$ 就可以写成 $\det(A - \lambda I_n)$ 的形式，其中 A 是 f 在这组基下的矩阵. 因此，我们得到了一个关于 λ 的方程：

$$\det(A - \lambda I_n) = 0. \tag{A.2}$$

将 λ 展开，我们得到一个关于 λ 的 n 次多项式，称为 f 的**特征多项式**. 这个多项式的根就是 f 的特征值.

我们需要验证特征多项式对于算子来说是良定义的，也就是不管怎么选取基，得到的特征多项式都是一样的.

命题 A.16 *设 A 是一个 n 阶方阵，P 是一个可逆方阵，那么 A 与 $P^{-1}AP$ 有相同的特征多项式.*

证明. $\det(P^{-1}AP - \lambda I_n) = \det(P^{-1}(A - \lambda I_n)P) = \det(P^{-1})\det(A - \lambda I_n)\det(P) = \det(A - \lambda I_n)$. □

有了特征值，其对应的特征向量完全由 V^λ 刻画. 在特定的基之下，我们可以用线性方程组的方式求出这个子空间一组基的坐标.

至此，我们有了求解特征值和特征向量的方法.

注. 根据上面的讨论，n 维内积空间的谱至多有 n 个元素，因而是离散的. 这一点在无穷维内积空间中也不成立，因而无穷维算子的谱要复杂得多. 无穷维谱理论在泛函分析、量子力学等领域有着广泛的应用. 然而遗憾的是，这些都超出了本书的范围.

利用定义，很容易写出矩阵特征值的性质：

命题 A.17 *设 A 是一个 n 阶方阵，λ 是 A 的一个特征值，v 是 λ 对应的特征向量，那么*

- *如果 A 可逆，那么 λ^{-1} 是 A^{-1} 的一个特征值，v 是 λ^{-1} 对应的特征向量；*
- *任意多项式 p，$p(\lambda)$ 是 $p(A)$ 的一个特征值，v 是 $p(A)$ 的一个特征向量.*

接下来，我们考虑一类特殊的线性算子，被称为自伴算子.

定义 A.40 (自伴算子) 设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个线性算子. 如果对任意 $x,y \in V$，都有 $\langle f(x),y\rangle = \langle x,f(y)\rangle$，那么称 f 是**自伴算子**.

我们指出，自伴算子的矩阵在标准正交基下是实对称矩阵，这可以从内积的矩阵表示看出. 假设 A 是 f 在标准正交基下的矩阵，对任意 $x,y \in V$，他们的坐标是 X,Y，那么 $\langle f(x),y\rangle = \langle x,f(y)\rangle$ 等价于 $(AX)^{\mathsf{T}}Y = X^{\mathsf{T}}(AY)$，也就是 $X^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}Y = X^{\mathsf{T}}AY$. 将 X,Y 取遍所有可能的向量，我们得到 $A^{\mathsf{T}} = A$.

自伴算子的谱可以有一个非常好的刻画：

定理 A.17 *设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个自伴算子，$\lambda \in \mathbb{R}$. 那么 f 的特征多项式所有根都是实根，因此 $\sigma(f)$ 是一个非空实数集. 此外，*

$$V = \bigoplus_{\lambda\in\sigma(f)} V^{\lambda}.$$

因此，存在一组标准正交基，使得 f 在这组基下的矩阵是对角矩阵，这组基就是 f 的特征向量. 此外，对角线上的元素恰好是 f 的特征值，对于 $\lambda \in \sigma(f)$，它在对角线上出现的次数就是 $\dim V^{\lambda}$.

这一证明非常类似定理 A.11 和定理 A.7 的证明，我们这里就不再赘述.

这一定理在矩阵上表述为：

推论 A.5 *对任意实对称矩阵 A，都存在一个正交矩阵 P 使得 $P^{-1}AP = P^{\mathsf{T}}AP$ 是对角矩阵，这个对角矩阵的对角线上的元素就是 A 的特征值.*

因此实对称矩阵可以通过一个正交矩阵相似并合同到对角矩阵.

这一结果在几何上有明确的意义. 设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个自伴算子，$v_1,\dots,v_n$ 是 f 对应的标准正交的特征向量基，那么 f 的作用就是将这些坐标轴拉伸或者压缩，或者反转. 例如，在 $\mathbb{R}^2$ 上，假设 $f(v_1)=-1.5v_1$，$f(v_2)=0.5v_2$，这一算子的效果可以用图 A.1 表示出来.

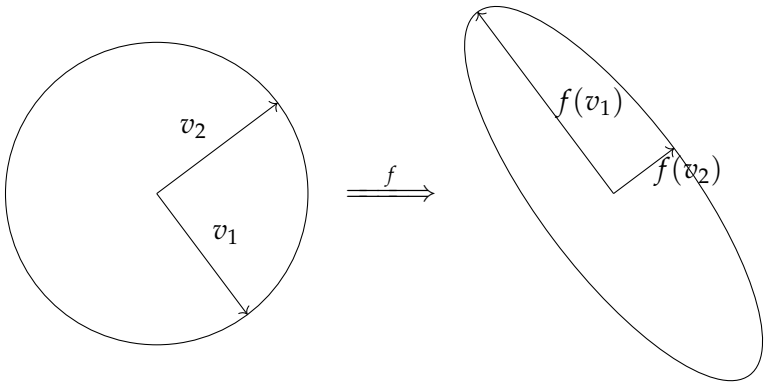


图 A.1: 自伴算子的作用

接下来，我们考虑自伴算子的范数与谱的关系. 设 f 是 V 上的一个自伴算子，那么根据定理 A.17，存在一组标准正交基 $e_1,\dots,e_n$，使得 $f(e_i)=\lambda_i e_i$，λ_i 是特征值（可重复）. 此时 f 对应的矩阵记为 A，它是一个对角矩阵. 考虑任何一个向量 $x\in V$，它的坐标是 X，那么

$$\|f(x)\|^2=\|AX\|^2=\sum_{i=1}^n\lambda_i^2x_i^2.$$

假设 $|\lambda_1|\geq|\lambda_2|\geq\cdots\geq|\lambda_n|$，那么

$$|\lambda_n|^2\sum_{i=1}^n x_i^2\leq\sum_{i=1}^n\lambda_i^2x_i^2\leq|\lambda_1|^2\sum_{i=1}^n x_i^2.$$

因此

$$|\lambda_n|\,\|x\|\leq\|f(x)\|\leq|\lambda_1|\,\|x\|.$$

从左到右，等号分别在 $x=e_n$ 和 $x=e_1$ 时取到. 因此，我们得到了

定理 A.18 *设 V 是一个 n 维内积空间，f 是 V 上的一个自伴算子，那么*

$$\|f\|=\max_{\lambda\in\sigma(f)}|\lambda|.$$

如果最大值在特征值 λ_0 取到，其对应单位特征向量是 e_0，那么 $\|f(e_0)\|=\|f\|=|\lambda_0|$.

最大的特征值模称为算子的*谱半径*. 从几何意义来说，谱半径就是算子对应的线性变换对应的线性变换对向量的最大拉伸率. 一个更直观的理解方式是，将这些基向量画一个球包起来，算子会将这个球映射到一个椭球，这个椭球的最长轴就是谱半径. 例如，对于图 A.1 中的算子，谱半径就是 1.5.

附录 B　微分学基础

本书中涉及的积分学很少，并且集中在概率论部分，所以在本附录中我们只讨论微分学，积分学的内容在附录 C.3 中简单介绍. 尽管我们的视角非常一般且抽象，但我们主要讨论的是 Euclid 空间 $\mathbb{R}^n$ 相关的微分学.

§B.1　点集拓扑

本部分讨论极限、连续、紧致等概念，这些概念是微分学的基础.

§B.1.1　度量空间，范数

实数集 $\mathbb{R}$ 上面的元素可以被看成一些点，这些点之间有距离的概念. 这是 $\mathbb{R}$ 最重要的几个性质之一. 我们把这种性质抽象出来，得到度量空间的概念.

定义 B.1 (度量空间) 设 X 是一个集合，$d : X \times X \to \mathbb{R}$ 是一个函数，如果满足

1. 非负性：对任意 $x, y \in X$，$d(x,y) \geq 0$，$d(x,y) = 0$ 当且仅当 $x = y$；
2. 对称性：对任意 $x, y \in X$，$d(x,y) = d(y,x)$；
3. 三角不等式：对任意 $x, y, z \in X$，$d(x,z) \leq d(x,y) + d(y,z)$.

则称 (X,d) 是一个**度量空间**，d 称为**度量**.

下面给出一些度量的例子，但我们不给出验证.

例 B.1 实数集 $\mathbb{R}$ 要成为度量空间，可以装备以下度量：

- 平凡的离散度量：对 $x_1 \neq x_2$，$d(x_1,x_2) = 1$；对 $x_1 = x_2$，$d(x_1,x_2) = 0$.
- 绝对值度量：$d(x_1,x_2) = |x_1 - x_2|$.

向量空间 $\mathbb{R}^n$ 要成为度量空间，可以装备以下度量：

- Minkowski 度量（L^p 度量）：$d(x_1,x_2)=(\sum_{i=1}^n|x_1^i-x_2^i|^p)^{1/p}$ $(p\geq 1)$.
- Manhattan 度量（L^1 度量）：$d(x_1,x_2)=\sum_{i=1}^n|x_1^i-x_2^i|$.
- Euclid 度量（L^2 度量）：$d(x_1,x_2)=\sqrt{\sum_{i=1}^n|x_1^i-x_2^i|^2}$.
- Chebyshev 度量（L^∞ 度量）：$d(x_1,x_2)=\max_i|x_1^i-x_2^i|=\lim_{p\to\infty}(\sum_{i=1}^n|x_1^i-x_2^i|^p)^{1/p}$.

再看一个抽象的例子. 假设 (X,d_X) 和 (Y,d_Y) 是两个度量空间，我们可以定义 $X\times Y$ 上的度量 d 为

$$d((x_1,y_1),(x_2,y_2))=d_{\mathbb{R}^2}(0,(d_X(x_1,x_2),d_Y(y_1,y_2))).$$

其中 $d_{\mathbb{R}^2}$ 为 $\mathbb{R}^2$ 上的某个度量. 容易验证这也是一个度量. □

上面关于 $\mathbb{R}^n$ 的例子都有一个特点，他们都是用向量 x_1-x_2 的某种长度定义的，这种长度的概念在数学中有一个统一的抽象，即*范数*.

定义 B.2 (范数，赋范空间) 设 X 是一个向量空间，$\|\cdot\|:X\to\mathbb{R}$ 是一个函数，如果满足

1. 非负性与非退化：对任意 $x\in X$，$\|x\|\geq 0$，且 $\|x\|=0$ 当且仅当 $x=0$；
2. 齐次性：对任意 $x\in X$，$\lambda\in\mathbb{R}$，$\|\lambda x\|=|\lambda|\,\|x\|$；
3. 三角不等式：对任意 $x,y\in X$，$\|x+y\|\leq\|x\|+\|y\|$.

则称 $\|\cdot\|$ 是 X 上的一个**范数**，$(X,\|\cdot\|)$ 称为一个**赋范空间**.

容易验证，例 B.1 中的度量都自然地导出了一个范数，即 $\|x\|=d(x,0)$. 我们可以沿袭度量的名字称呼这些范数，例如 L^p 范数就是 L^p 度量所诱导的范数. 很多无穷维线性空间都是先有范数才有空间本身的. 例如，ℓ^p 空间就是由 L^p 范数划定的：

$$\ell^p=\left\{x\in\mathbb{C}^\infty:\|x\|_p=\left(\sum_{i=1}^\infty|x_i|^p\right)^{1/p}<\infty\right\}.$$

此外，函数空间 $C[a,b]$ 也可以定义范数，例如

$$\|f\|_\infty=\sup_{x\in[a,b]}|f(x)|.$$

反之，任何一个范数都可以导出一个度量，即 $d(x,y)=\|x-y\|$. 这一结论可以总结为如下性质：

定理 B.1 设 X 是一个向量空间，$\|\cdot\|$ 是 X 上的一个范数，则 $d(x,y)=\|x-y\|$ 是 X 上的一个度量，称之为**范数诱导的度量**. 反之，如果 d 是 X 上的一个度量，则 $\|x\|=d(x,0)$ 是 X 上的一个范数当且仅当对任意 $x,y,z\in X$，$\lambda\in\mathbb{R}$，有

1. 平移不变性：$d(x+z,y+z)=d(x,y)$；
2. 相似性：$d(\lambda x,\lambda y)=|\lambda|d(x,y)$.

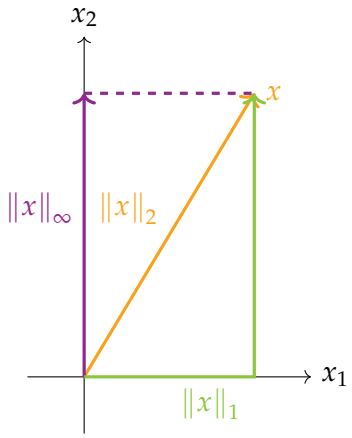
尽管都是 $\mathbb{R}^n$，但是不同 p 对应的 L^p 范数是不一样的. 他们之间有如下的关系：

命题 B.1 设 $1\le p\le q\le\infty$，则对任意 $x\in\mathbb{R}^n$，有

$$\|x\|_p\ge\|x\|_q.$$

这一命题的证明依赖于 Hölder 不等式，这里不给出细节了.

要想对这一不等式有更好的直观，我们可以考虑 $n=2$ 以及 $p=1,2,\infty$ 的极端情形. 如下图所示，我们要从原点到点 x. 绿色的是 $\|x\|_1=|x_1|+|x_2|$，相当于沿着坐标轴走；而橙色的是 $\|x\|_2=\sqrt{x_1^2+x_2^2}$，相当于沿着对角线走，肯定比沿着坐标轴走要快；紫色的是 $\|x\|_\infty=\max\{|x_1|,|x_2|\}$，相当于挑了较长的那条边走，仿佛虫洞一样，走完了就到了，所以甚至比对角线还快.



然而，我们在后面会看到，从拓扑学的角度来说，这些度量并没有本质的区别，这是因为：

命题 B.2 设 $1\le p\le q\le\infty$，则存在正常数 $c_{p,q}$ 和 $C_{p,q}$，对任意 $x,y\in\mathbb{R}^n$，

$$c_{p,q}\|x\|_q\le\|x\|_p\le C_{p,q}\|x\|_q.$$

这一证明也依赖于 Hölder 不等式，所以也略去.

这一命题说明，虽然不同的范数对应的度量不同，但是他们之间的关系是最多差个常数倍. 我们后面会看到，这一性质表明 L^p 范数定义的所有拓扑性质都是完全相同的. 这一性质也可以一般化：

定义 B.3 (等价范数) 设 X 是一个向量空间，$\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 是 X 上的两个范数，如果存在正常数 c, C，使得对任意 $x \in X$，有

$$c\|x\|_1 \leq \|x\|_2 \leq C\|x\|_1,$$

则称 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$ 是**等价**的.

§B.1.2 开集与闭集

接下来我们进一步进行讨论 $\mathbb{R}^n$ 空间的拓扑性质. 拓扑学是关于开集的学问，给定所有的开集，我们就可以研究一个空间的拓扑性质.

在 $\mathbb{R}$ 中，很早就已经有了开区间的概念，它指的是集合 $(a,b) = \{x \in \mathbb{R} : a < x < b\}$. $\mathbb{R}$ 中的开集定义其实很简单，就是若干开区间的并集. 在更一般的拓扑空间中，开集的定义也是类似的. 我们将视角聚焦在度量空间中. 我们可以把开区间 (a,b) 看成一个圆心在 $(a+b)/2$，半径为 $(b-a)/2$ 的一维开球. 从这个视角看，开集的定义是从开球给出的. 这样的定义有一般性：

定义 B.4 (开球，开集，拓扑空间) 设 (X,d) 是一个度量空间，$x \in X$，$r > 0$，定义

$$B(x,r) = \{y \in X : d(x,y) < r\}.$$

称 $B(x,r)$ 是以 x 为球心，r 为半径的**开球**.

集合 $U \subseteq X$ 被称为**开集**，如果它是若干开球的并集.

X 连同它的所有开集，被称为**拓扑空间**[1].

在通常的微积分教科书上，我们会看到另一种开集的定义，即开集是任意一点都可以找到一个开球包含在这个集合中. 这两种定义是等价的：

命题 B.3 *设 (X,d) 是一个度量空间，$U \subseteq X$，则 U 是开集当且仅当对任意 $x \in U$，存在 $r > 0$，使得 $B(x,r) \subseteq U$.*

[1] 一般拓扑空间的定义是给出所有开集的集合，并要求他们满足某种封闭性，然而我们这里只关心度量空间，此时可以构造性地给出所有开集.

证明. $\Longrightarrow$：设 U 是开集，$x \in U$，$U = \bigcup_{i\in I} B(x_i, r_i)$，则存在 $i \in I$，使得 $x \in B(x_i, r_i)$，取 $r = r_i - d(x, x_i)$，显然 $r > 0$，并且 $B(x, r) \subseteq B(x_i, r_i) \subseteq U$.

$\Longleftarrow$：设对任意 $x \in U$，存在 $r_x > 0$，使得 $B(x, r_x) \subseteq U$，则 $U = \bigcup_{x\in U} B(x, r_x)$，是开集. □

本书给的定义是一个更拓扑、更整体的定义：开集就是由基本的开集（开球）经过任意次的并得到的集合，这一定义关心集合而不是具体的点. 而等价的定义，我们称之为*点定义*，是更局部的定义，这一定义关心点而不是集合. 今后的定义，我们都尝试用两种方式给出，特别地，拓扑的定义只使用开集而不使用度量.

我们给几个开集的例子：

例 B.2 (范等价拓扑空间) 设 X 是一个线性空间，它上面有两个等价的范数 $\|\cdot\|_1$ 和 $\|\cdot\|_2$[2]. 我们要证明，两个赋范空间 $(X, \|\cdot\|_1)$ 和 $(X, \|\cdot\|_2)$ 定义了相同的拓扑空间. 因此，在拓扑意义下，$\mathbb{R}^n$ 空间到底装备了哪个 L^p 范数是不重要的，因此对于同一个数学对象（集合、序列、函数）来说，收敛性和连续性在 L^p 范数下都是完全一样的.

下面我们来证明这一点. 我们用开集的点定义. 设 U 是 $(X, \|\cdot\|_1)$ 中的开集，$x \in U$，则存在 $r > 0$，使得 $B_1(x, r) \subseteq U$，由范数等价，存在 $c, C > 0$，使得 $c\|x\|_2 \leq \|x\|_1 \leq C\|x\|_2$，则 $B_2(x, r/c) \subseteq B_1(x, r) \subseteq U$，所以 U 是 $(X, \|\cdot\|_2)$ 中的开集. 反之亦然. □

例 B.3 (乘积拓扑空间) 设 (X_1, d_1) 和 (X_2, d_2) 是两个度量空间，则 $X_1 \times X_2$ 上的开集有两种自然的方式给出：

1. 对任意开集 $U_1 \subseteq X_1$ 和 $U_2 \subseteq X_2$，定义 $U_1 \times U_2$ 是 $X_1 \times X_2$ 上的开集，然后利用这些基本的开集的任意并给出所有开集；
2. 规定 $X_1 \times X_2$ 上的度量 d，然后利用这个度量给出开集.

把度量 d 定义为

$$d((x_1, y_1), (x_2, y_2)) = \|(d_1(x_1, x_2), d_2(y_1, y_2))\|,$$

其中 $\|\cdot\|$ 是 $\mathbb{R}^2$ 的某个 L^p 范数. 可以证明，这两种方式给出了 $X_1 \times X_2$ 上相同的拓扑.

因此，以后讨论“拓扑空间 $X \times Y$”的地方，不管明里暗里，所指的拓扑空间都是由这两种等价方式给出的. 这一结论可以推广到任意有限个度量空间的乘积. □

开集的重要性质是：

[2]注意，对一般空间来说，这样的记号不意味着 L^1 或者 L^2 范数.

命题 B.4 设 (X,d) 是一个非空度量空间，则

1. X 和 $\varnothing$ 是开集；
2. 任意个开集的并集是开集；
3. 有限个开集的交集是开集.

证明. 1. 取 $x \in X$，则 $X = \bigcup_{r>0} B(x,r)$，是开集. $\varnothing$ 是零个（也是若干个）开集的并集，是开集.

2. 设 $\{U_i\}_{i\in I}$ 是一族开集，$U_i = \bigcup_{j\in J_i} B(x_j,r_j)$，显然 $U = \bigcup_{i\in I} U_i = \bigcup_{i\in I, j\in J_i} B(x_j,r_j)$，是开集.

3. 设 $U_1,\dots,U_n$ 是开集，$U = \bigcap_{i=1}^n U_i$，对任意 $x \in U$，对任意 $i = 1,\dots,n$，$x \in U_i$，由开集的点定义，存在 $r_i > 0$，使得 $B(x,r_i) \subseteq U_i$，取 $r = \min_{i=1}^n r_i$，则 $B(x,r) \subseteq U_i$，所以 U 是开集. □

注意，开集只对有限交封闭. 可以看一个简单的例子：$\bigcap_{n=1}^{\infty}(-1/n,1/n) = \{0\}$，但是 $\{0\}$ 不是开集，因为这个集合不可能包含任何开球.

命题 B.4 其实就是一般拓扑空间中开集要满足的三条公理. 我们之所以将它写为命题，是因为我们的开集定义基于度量空间，而非一般的拓扑空间.

与开集相对应的是闭集的概念. 闭集的定义是：

定义 B.5 (闭集) 设 (X,d) 是一个度量空间，$F \subseteq X$，如果 $X \setminus F$ 是开集，则称 F 是**闭集**.

闭集的定义是开集的对偶，所以有如下性质：

命题 B.5 设 (X,d) 是一个非空度量空间，则

1. X 和 $\varnothing$ 是闭集；
2. 任意个闭集的交集是闭集；
3. 有限个闭集的并集是闭集.

开集和闭集的定义是对偶的，但是性质却完全不同. 开集似乎可以简单理解为开区间的推广，即把开区间拼起来，它的构造是“把东西放进来”. 闭集是把若干开区间挖出来得到的集合，它的构造方式是“把东西拿出去”，这样的构造对我们来说是不够直观的. 我们可以构造非常奇怪的闭集，例如 Cantor 集就是例子.

§B.1.3 紧致性，收敛性，完备性

接下来我们讨论一个更微妙的概念，*紧致性*或者*紧集*. 紧致性与极限、收敛、连续等概念有着密切的联系，然而如何恰当的定义紧致性是一个很难的问题. 我们这里不讨论历史，只给出历史的答案. 简单来说，*紧*这个词的概念是*压缩*，将无穷多的东西变成有限个. 我们的逻辑推理只能处理有限的东西，所以紧致性是沟通无穷和有限的桥梁. 下面给出紧集的定义：

定义 B.6 (开覆盖，紧集) 设 (X,d) 是一个度量空间，$F \subseteq X$，如果存在一族开集 $\{U_i\}_{i\in I}$，使得 $F \subseteq \bigcup_{i\in I} U_i$，则称 $\{U_i\}_{i\in I}$ 是 F 的一个**开覆盖**.

如果对任意 F 的开覆盖 $\{U_i\}_{i\in I}$，都存在有限子覆盖 $\{U_{i_j}\}_{j=1}^n$，使得 $F \subseteq \bigcup_{j=1}^n U_{i_j}$，则称 F 是**紧集**.

第一次看到这样的定义大概率会不知所云. 然而，我们没有办法将它还原为更直观的定义了. 例如，即便在最基本的集合 $\mathbb{R}$ 上，紧集的存在性也只能被作为与实数公理[3]等价的命题存在：

命题 B.6 (Heine-Borel 有限覆盖原理) *设 F 是 $\mathbb{R}$ 的一个闭区间，对任意 F 开覆盖 $\{U_i\}_{i\in I}$，存在有限子覆盖 $\{U_{i_j}\}_{j=1}^n$.*

这一原理说明，闭区间是紧集，因而给出了 $\mathbb{R}$ 中紧集的存在性.

在度量空间上，紧集与收敛性密切相关. 为此，我们需要形式地定义度量空间中的收敛概念. 我们先使用 $\epsilon - N$ 语言定义：

定义 B.7 (收敛，极限) 设 (X,d) 是一个度量空间，$\{x_n\}_{n=1}^\infty$ 是 X 中的一个序列，$x \in X$，如果对任意 $\epsilon > 0$，存在 $N \in \mathbb{N}$，使得对任意 $n > N$，$d(x_n, x) < \epsilon$，则称 $\{x_n\}_{n=1}^\infty$ **收敛**到 x，记作 $\lim_{n\to\infty} x_n = x$ 或 $x_n \to x$，$n \to \infty$，x 称为 $\{x_n\}_{n=1}^\infty$ 的**极限**.

这一定义描绘了一幅图像：一列点越来越接近某个点 x. 如果我们将定义中的 N 取掉，这一直观会更清楚：对任意 $\epsilon > 0$，除掉有限个 n（也就是前 N 个），都有 $x_n \in B(x,\epsilon)$. 所谓越来越接近，指的就是画任意一个球 $B(x,\epsilon)$，除去有限个 x_n，剩下的所有 x_n 都在这个球里面. 这一想法给出了只基于开集的等价定义：

命题 B.7 *设 (X,d) 是一个度量空间，$\{x_n\}_{n=1}^\infty$ 是 X 中的一个序列，$x \in X$，则 $\{x_n\}_{n=1}^\infty$ 收敛到 x 当且仅当对任意包含 x 的开集 U，存在 $N \in \mathbb{N}$，使得对任意 $n > N$，$x_n \in U$.*

[3] 当然，这样的说法把实数集作为一个数学对象，试图用公理定义出来，而不是从已有的数学对象构造出来（例如 Dedekind 分割）.

证明. $\Longrightarrow$：设 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 收敛到 x，U 是包含 x 的开集，由开集的点定义，存在 $r>0$，使得 $B(x,r)\subseteq U$，由收敛的定义，存在 $N\in\mathbb{N}$，使得对任意 $n>N$，$d(x_n,x)<r$，所以 $x_n\in B(x,r)\subseteq U$.

$\Longleftarrow$：设对任意包含 x 的开集 U，存在 $N\in\mathbb{N}$，使得对任意 $n>N$，$x_n\in U$，则对任意 $\epsilon>0$，取 $U=B(x,\epsilon)$，则存在 $N\in\mathbb{N}$，使得对任意 $n>N$，$x_n\in B(x,\epsilon)$，即 $d(x_n,x)<\epsilon$，所以 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 收敛到 x. □

在一般的拓扑空间中，甚至都没有度量的概念，然而，开集定义收敛依然是可以的. 这正是这一命题的意义.

下面给一些收敛的经典例子：

例 B.4
- 在 $\mathbb{R}$ 中，$\{1/n\}_{n=1}^{\infty}$ 收敛到 0，然而，序列 $\{n\}_{n=1}^{\infty}$ 则不收敛. 这个例子表明，极限未必需要在序列中出现，以及趋于无穷是一种特殊的不收敛.
- 在 $\mathbb{R}^n$ 和 L^p 范数下，$\{x_k\}_{k=1}^{\infty}$ 收敛到 x，当且仅当对任意 $i=1,\dots,n$，$\{x_k^i\}_{k=1}^{\infty}$ 收敛到 x^i，其中 $x_k=(x_k^1,\dots,x_k^n)$，$x=(x^1,\dots,x^n)$. 这个例子表明，高维空间中的收敛性可以从每个分量看.
- 在 $C([0,1])$ 和 L^{∞} 范数下，$f_n\to f$ 实际上是所谓**一致收敛**的概念，即对任意 $\epsilon>0$，存在不依赖 x 的 $N\in\mathbb{N}$，使得对任意 $n>N$，任意 $x\in[0,1]$，$|f_n(x)-f(x)|<\epsilon$. 在这一概念下，$\{x^n\}_{n=1}^{\infty}$ 就不收敛（尽管它逐点收敛）. □

度量空间中紧集可以完全由收敛性来刻画：

定理 B.2 *设 (X,d) 是一个度量空间，$F\subseteq X$，则 F 是紧集当且仅当 F 中的任意序列都有收敛子列.*

这一定理的证明并不算困难，但是需要陈述的事实较多，且与本书关联不大，所以这里都略去.

定理 B.2 足以表明紧集这一概念的重要性了. 然而，这一定理的成立只需要度量空间，度量空间是一个非常弱的概念，我们关心的 $\mathbb{R}^n$ 空间实际上有更强的性质，这一性质是*完备性*. 要定义完备性，我们需要 *Cauchy 列*.

定义 B.8 (Cauchy 列) 设 (X,d) 是一个度量空间，$\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是 X 中的一个序列，如果对任意 $\epsilon>0$，存在 $N\in\mathbb{N}$，使得对任意 $m,n>N$，$d(x_m,x_n)<\epsilon$，则称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是一个 **Cauchy 列**.

Cauchy 列描述了另一种收敛的概念，它要求的是序列中的点越来越相互接近，而不是越来越接近某个点. 注意，这一定义没有办法像收敛性一样给一个纯拓扑的定义，所以 Cauchy 列的概念是依赖于度量的.

Cauchy 列与收敛列的关系如下. 首先，收敛的点列是 Cauchy 列：

命题 B.8 *设 (X,d) 是一个度量空间，$\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是 X 中的一个序列，如果 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 收敛，则 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是 Cauchy 列.*

证明. 设 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 收敛到 x，则对任意 $\epsilon > 0$，存在 $N \in \mathbb{N}$，使得对任意 $n > N$，$d(x_n, x) < \epsilon/2$，所以对任意 $m, n > N$，$d(x_m, x_n) \leq d(x_m, x) + d(x, x_n) < \epsilon$，所以 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是 Cauchy 列. □

反过来，Cauchy 列是否一定收敛呢？这一问题的答案是不一定. 在 $\mathbb{R}$ 上，就如同有限覆盖原理，这件事的成立性只能作为与实数公理等价的命题存在！完备性指的就是 Cauchy 列一定收敛的性质：

定义 B.9 (完备度量空间) 设 (X,d) 是一个度量空间，如果 X 中的任意 Cauchy 列都收敛，则称 (X,d) 是一个**完备度量空间**.

我们不加证明地给出完备度量空间的例子：

例 B.5

- 有限维空间的例子：L^p 范数下 $\mathbb{R}^n$ 是完备的.
- 反面的例子：使用度量 $d(x_1, x_2) = |x_1 - x_2|$，则 $X = \mathbb{R} \setminus \{0\}$ 不是完备度量空间. 考虑 $\{x_n = \frac{1}{n} : n \in \mathbb{N}\}$，它是 Cauchy 列，但该点列在 X 中没有极限（极限是 0）.
- 无穷维空间的例子：$[0,1]$ 到 $\mathbb{R}$ 的连续函数空间 $C([0,1])$ 在 L^∞ 范数下是完备的.
- 无穷维空间的另一个例子：ℓ^p 空间是完备的. □

最后我们指出，尽管完备度量空间已经足够发展微积分了，但是它和 $\mathbb{R}^n$ 依然有一个本质的区别，这一区别在于紧集. 首先，在有限维情况下，紧集与有界闭集是等价的：

定理 B.3 *设 $\mathbb{R}^n$ 装备了 L^p 范数，设 $F \subseteq \mathbb{R}^n$，那么 F 是紧集当且仅当 F 是有界闭集，有界指的是存在 $M > 0$，使得对任意 $x \in F$，$\|x\|_p \leq M$.*

这一命题的证明依赖于 Heine-Borel 有限覆盖原理，这里就不给出细节了.

然而，在无穷维空间中，这一命题不一定成立：

命题 B.9 设 ℓ^2 空间的标准正交向量组是 $\{e_i\}_{i=1}^{\infty}$，e_i 是第 i 个分量为 1，其他分量为 0 的向量. 考虑单位球面 $E = \{x \in \ell^2 : \|x\|_2 = 1\}$，则 E 是有界闭集，但不是紧集.

证明. 因为对任意 $x \in E$，$\|x\| = 1$，所以 $\|x\|_2 \leq 1$，所以 E 是有界集. 取 $x \in \ell^2 \setminus E$. 如果 $\|x\| = r < 1$，那么开球 $B(x,(1-r)/2) \subseteq B(0,1) \subseteq \ell^2 \setminus E$；对于 $r > 1$ 可以同理讨论. 这就证明了 E 是闭集. 最后证明 E 不是紧集. 考虑序列 $\{e_i\}_{i=1}^{\infty}$，它是 E 中的序列，因为对任意不同的 m,n，$\|e_m - e_n\| = 2$，因此 $\{e_i\}$ 的任何子列都不是 Cauchy 列，根据命题 B.8 的逆否命题，$\{e_i\}$ 没有任何收敛子列，因而根据定理 B.2，E 不是紧集. □

§B.1.4 连续映射

接下来我们讨论两个拓扑空间之间的映射. 我们说过，拓扑空间完全由开集给出，所以某种程度保持拓扑性质的映射也会与开集有关系. 对于微积分来说，连续性是其中最重要的一种. 遵循先前的惯例，我们先给出更像微积分的 δ-ϵ 语言的点定义，然后再给出更像拓扑的定义.

δ-ϵ 语言的定义是从映射的极限这一概念出发的：

定义 B.10 (映射的极限) 设 (X,d_X) 和 (Y,d_Y) 是两个度量空间，$f : X \to Y$ 是一个映射，$x_0 \in X, y \in Y$，如果对任意 $\epsilon > 0$，存在 $\delta > 0$，使得对任意 $x \in X$，如果 $0 < d_X(x,x_0) < \delta$，则 $d_Y(f(x),y) < \epsilon$，则称 y 是 f 在 x_0 处的**极限**，记作 $\lim_{x\to x_0} f(x) = y$ 或 $f(x) \to y$，$x \to x_0$.

注意，定义中我们划定了 x 的范围，即 $x \neq x_0$. 此时极限的概念由去心邻域 $B(x_0,\delta) \setminus \{x_0\}$ 给出，这样做允许极限并不等于 $f(x_0)$ 本身.

注. 映射的极限还可以定义自变量趋于无穷、单侧极限以及其他情况，我们后面会使用这些概念，他们的直观含义都是明确的，这里我们不再给出正式定义，我们只给出他们的记号：

- 趋于无穷：$\lim_{x\to\infty} f(x) = y$ 或 $f(x) \to y$，$x \to \infty$；
- 如果定义域是 $\mathbb{R}$，还可以定义趋于正、负无穷：$\lim_{x\to+\infty} f(x) = y$ 或 $f(x) \to y$，$x \to +\infty$，$\lim_{x\to-\infty} f(x) = y$ 或 $f(x) \to y$，$x \to -\infty$；
- 单调递增趋于：$x \uparrow x_0$，单调递减趋于：$x \downarrow x_0$. 这些记号既可以出现在自变量中，也可以出现在函数值中，例如我们可以写 $n/(n+1) \uparrow 1$，$n \to \infty$.
- 如果定义域是 $\mathbb{R}$，还可以定义单侧极限，从负向趋于某点（左极限）：$\lim_{x\uparrow x_0} f(x) = y$ 或 $f(x) \to y$，$x \uparrow x_0$，以及从正向趋于某点（右极限）：$\lim_{x\downarrow x_0} f(x) = y$ 或 $f(x) \to y$，$x \downarrow x_0$.

由此，我们可以定义连续映射：

定义 B.11 (连续映射) 设 (X, d_X) 和 (Y, d_Y) 是两个度量空间，$f : X \to Y$ 是一个映射，考虑点 $x \in X$，如果 $\lim_{x' \to x} f(x') = f(x)$，则称 f 在 x 处**连续**，如果 f 在 X 的每一点都连续，则称 f 是**连续映射**.

直观上说，连续映射是指，x' 和 x 足够接近的时候 $f(x')$ 和 $f(x)$ 也足够接近. 不过，数学定义其实是反过来的：想让 $f(x')$ 和 $f(x)$ 足够接近，我们只需要让 x' 和 x 足够接近. 更精确一些来说，如果我们画了一个 $f(x)$ 的任意小的范围，我们只需要找到一个 x 的范围，使得 x 的范围里的点都被映射到 $f(x)$ 的范围里. 这一定义可以用开集来表述，为此，我们需要先引入一些关于映射的概念.

定义 B.12 (像，原像) 设 $f : X \to Y$ 是一个映射，$A \subseteq X$，则 $f(A) = \{f(x) : x \in A\}$ 称为 A 的**像**，如果 $B \subseteq Y$，则 $f^{-1}(B) = \{x \in X : f(x) \in B\}$ 称为 B 的**原像**.

于是，我们可以用开集表述极限和连续性了：

定理 B.4 *设 (X, d_X) 和 (Y, d_Y) 是两个度量空间，$f : X \to Y$ 是一个映射，则*

1. *$\lim_{x \to x_0} f(x) = y$ 当且仅当对任意包含 y 的开集 $U \subseteq Y$，存在包含 x_0 的开集 $V \subseteq X$，使得 $f(V \setminus \{x_0\}) \subseteq U$;*
2. *f 在 $x \in X$ 处连续当且仅当对任意包含 $f(x)$ 的开集 $U \subseteq Y$，存在包含 x 的开集 $V \subseteq X$，使得 $f(V) \subseteq U$.*

这一命题的证明非常类似命题 B.3，我们这里就不给出了. 注意，极限的开集定义所用的集合 $V \setminus \{x_0\}$ 也是一个开集，它是 x_0 的去心邻域，所以这一定义确实是纯拓扑的.

连续映射的定义也可以完全由拓扑给出：

定理 B.5 *设 (X, d_X) 和 (Y, d_Y) 是两个度量空间，$f : X \to Y$ 是一个映射，则下列表述等价：*

1. *f 是连续映射;*
2. *对任意 Y 中的开集 U，原像 $f^{-1}(U)$ 是 X 中的开集;*
3. *对任意 Y 中的闭集 F，原像 $f^{-1}(F)$ 是 X 中的闭集.*

利用定理 B.4、命题 B.5 以及开集的定义，很容易证明这一命题，这里不再赘述.

例 B.6 在不给任何额外定义的时候，我们有一个非常自然的连续映射的例子，那就是**度量**. 设 (X,d) 是一个度量空间，我们证明度量 $d: X\times X\to\mathbb{R}$ 是一个连续函数.

我们利用点连续的定义，证明 d 在每一点都连续. 设 $(x_1,y_1)\in X\times X$. 我们利用定理 B.4 和原始定义的混合版本. 注意到要证明所有包含 $d_0=d(x_1,y_1)$ 的开集 U 满足条件，根据 U 的构造，只需要证明，对任意 $\epsilon>0$，$B(d_0,\epsilon)$ 满足条件. 为此，取一个包含 (x_1,y_1) 的开集 $V=B(x_1,\epsilon/2)\times B(y_1,\epsilon/2)$（关于这个为什么是开集，详细讨论见例 B.3），则对任意 $(x_2,y_2)\in V$，有 $d(x_1,x_2)<\epsilon/2$，$d(y_1,y_2)<\epsilon/2$，所以根据三角不等式，

$$d(x_2,y_2)\le d(x_1,y_1)+d(x_1,x_2)+d(y_1,y_2)<d_0+\epsilon/2+\epsilon/2=d_0+\epsilon.$$

另一方面，

$$\begin{aligned}&d_0=d(x_1,y_1)\le d(x_2,y_2)+d(x_1,x_2)+d(y_2,y_1)<d(x_2,y_2)+\epsilon\\\Longrightarrow\ &d(x_2,y_2)>d_0-\epsilon.\end{aligned}$$

所以，$d(x_2,y_2)\in B(d_0,\epsilon)$，即 $V\subseteq B(d_0,\epsilon)$，所以 d 在 (x_1,y_1) 连续. 因为 (x_1,y_1) 是任意的，所以 d 是连续的.

一个直接的推论是，范数 $\|\cdot\|$ 也是连续函数. □

连续性的定义实际分为了两部分，一个是局部的、点的连续性，另一个是整体的、只依赖开集而不依赖具体点的定义. 他们也对应了连续不同的性质.

我们首先讨论局部连续的性质，以下命题我们都不再给出证明. 首先，极限也可以用收敛性刻画：

定理 B.6 *设 (X,d_X) 和 (Y,d_Y) 是两个度量空间，$f:X\to Y$ 是一个映射，$x_0\in X$，$y\in Y$，则下列表述等价：*

1. $\lim_{x\to x_0}f(x)=y$.
2. *对任意 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 满足 $x_0\notin\{x_n\}$，如果 $x_n\to x_0$，则 $f(x_n)\to y$.*

利用这一条，很快就可以得到连续的序列版本：

推论 B.1 *设 (X,d_X) 和 (Y,d_Y) 是两个度量空间，$f:X\to Y$ 是一个映射，则下列表述等价：*

1. *f 在 $x\in X$ 连续.*

2. 对任意 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$，如果 $x_n \to x$，则 $f(x_n) \to f(x)$.

其次，连续对复合是封闭的：

命题 B.10 设 (X,d_X)、(Y,d_Y) 和 (Z,d_Z) 是三个度量空间，$f: X \to Y$ 在 $x \in X$ 连续，$g: Y \to Z$ 在 $f(x) \in Y$ 连续，则 $g \circ f: X \to Z$ 在 $x \in X$ 连续.

利用以上两个性质，在赋范空间中，我们得到如下结论：

推论 B.2 设 $(X, \|\cdot\|_X)$ 是赋范空间，则数乘是 $X \to X$ 的连续映射，向量加法是 $X \times X \to X$ 的连续映射. 因此，有限维线性空间到有限维线性空间的线性映射都是连续映射.

根据推论 B.1，这一结论也有对应的序列版本，我们就不再列出了. 特别要注意的是，这一结论也适用于 $\mathbb{R}$. 将乘法 $\times: \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 和除法 $\div: \mathbb{R} \times (\mathbb{R} \setminus \{0\}) \to \mathbb{R}$ 看成向量空间 $\mathbb{R}$ 上的数乘运算，于是他们也都是连续映射[4].

最后，连续意味着有界：

命题 B.11 设 (X,d_X) 和 (Y,d_Y) 是两个度量空间，$f: X \to Y$ 在 $x \in X$ 连续，则在 x 的某个邻域上 f 有界，即存在 $r, M > 0$，对任意 $y \in B(f(x), r)$，有 $d_Y(f(x), y) \leq M$.

接下来我们讨论连续映射整体的性质，这些性质都与紧集有关. 首先，连续映射将紧集映射为紧集：

命题 B.12 设 (X,d_X) 和 (Y,d_Y) 是两个度量空间，$f: X \to Y$ 是一个连续映射，$F \subseteq X$ 是紧集，则 $f(F)$ 是紧集.

其他性质将在下一节给出.

§B.1.5 与实数序有关的性质

本节要讨论的性质都限制映射的值是实数，即 $f: X \to \mathbb{R}$. 这样的映射我们称之为*实值函数*或简单称为*函数*. $\mathbb{R}$ 与 $\mathbb{R}^n$ 最大的不同是实数可以比大小而实数向量不行. 实数与大小相关的性质可以被称为*序的性质*.

下面，我们列出其中两个与实数公理等价的序性质. 这些性质需要用到*单调性*、*界*和*确界*的概念，这些概念将会频繁出现在我们的讨论中，所以这里单独给出：

定义 B.13 (单调性) 设 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是一个实数列.

[4]尽管从证明的逻辑顺序来说，应该是先有了实数的四则运算连续性，然后才有了赋范空间的连续性. 我们这样写是为了避免将类似的结论重复讲多次.

- 如果对任意 $n \in \mathbb{N}$，$x_n \leq x_{n+1}$，则称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是一个**单调递增**的实数列.
- 如果对任意 $n \in \mathbb{N}$，$x_n \geq x_{n+1}$，则称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是一个**单调递减**的实数列.
- 如果 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是单调递增的或单调递减的，则称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是一个**单调**的实数列.

定义 B.14 (上界，上确界，下界，下确界) 设 $A \subseteq \mathbb{R}$.

- 如果存在 $M \in \mathbb{R}$，使得对任意 $a \in A$，$a \leq M$，则称 M 是 A 的一个**上界**.
- 如果 M 是 A 的上界，且对任意 $M' < M$，存在 $a \in A$，使得 $a > M'$，则称 M 是 A 的一个**上确界**，记作 $\sup A$.
- 类似地，如果存在 $M \in \mathbb{R}$，使得对任意 $a \in A$，$a \geq M$，则称 M 是 A 的一个**下界**.
- 如果 M 是 A 的下界，且对任意 $M' > M$，存在 $a \in A$，使得 $a < M'$，则称 M 是 A 的一个**下确界**，记作 $\inf A$.
- 如果一个集合有上（下）界，则称这个集合**上（下）有界**，如果它既有上界又有下界，则称这个集合**有界**.

上确界这个概念就是在说“最小可能的上界”，下确界也有类似的解读.
现在我们可以阐述这两个实数序的性质了. 第一个是说单调有界的序列一定收敛.

命题 B.13 (单调有界原理) *设 $\{x_n\}$ 是一个单调有界的实数列，则 $\{x_n\}$ 收敛.*

接下来一个是说有上（下）界的实数集一定有上（下）确界，即最小可能的上（下）界是一个确实存在的实数，这也是一种完备性的体现.

命题 B.14 (确界原理) *设 $A \subseteq \mathbb{R}$，如果 A 有上界，则 $\sup A$ 存在；如果 A 有下界，则 $\inf A$ 存在.*

确界原理给了一种求确界的方式：

命题 B.15 *设 $A \subseteq \mathbb{R}$，如果 A 有上界，则存在一列 $\{a_n\}$，使得 $a_n \in A$，且 $\lim_{n\to\infty} a_n = \sup A$.*

证明. 设 $M = \sup A$（由确界原理知 M 存在），对任意 $n \in \mathbb{N}$，由 $M - 1/n$ 不是 A 的上界，存在 $a_n \in A$，使得 $M - 1/n < a_n \leq M$. 根据极限的定义易知 $\lim_{n\to\infty} a_n = M$. □

对于实值函数来说，我们还需要比较在极限情况下两个函数的渐进大小，这就是 o 和 $\mathcal{O}$ 符号. 我们先给出这一概念在序列上的定义：

定义 B.15 (阶，无穷小，等价) 设 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 和 $\{y_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是两个序列.

- 如果 $\lim_{n\to\infty} \frac{x_n}{y_n} = 0$，则称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是 $\{y_n\}_{n=1}^{\infty}$ 的**高阶无穷小**，记作 $x_n = o(y_n)$.
- 如果存在一个正常数 C 使得除去有限个 n 都有 $|x_n| \leq C|y_n|$，则称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 的**阶不高于** $\{y_n\}_{n=1}^{\infty}$，记作 $x_n = \mathcal{O}(y_n)$.
- 如果 $x_n = \mathcal{O}(y_n)$ 且 $y_n = \mathcal{O}(x_n)$，那么称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 和 $\{y_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是**同阶**的.
- 如果进一步 $\lim_{n\to\infty} \frac{x_n}{y_n} = 1$，则称 $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ 和 $\{y_n\}_{n=1}^{\infty}$ 是**等价**的，记作 $x_n \sim y_n$.

上述定义可以非常自然迁移到函数上，我们不再赘述. 下面是一些例子：

例 B.7
- $n \to \infty$ 时，$n^2 = o(2^n)$，$n^{1/n} \sim 1$，$n^2 \sim n^2 + \log n$.
- $x \to 0$ 时，$\sin x \sim x$，$1/x = o(1/x^2)$.
- $n \to \infty$ 时，$\sum_{k=1}^{n} \frac{1}{n} \sim \ln n$. □

最后，我们回到连续的整体性质上来. 首先是 Weierstrass 最值定理：

定理 B.7 (Weierstrass 最值定理) *紧集上的连续函数 $f : F \to \mathbb{R}$ 在该紧集 F 的某个点取最大（最小）值.*

然后是介值定理：

定理 B.8 (介值定理) *设 $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ 是一个连续函数，$f(a) < f(b)$，则对任意 $y \in (f(a), f(b))$，存在 $x \in (a,b)$，使得 $f(x) = y$.*

介值定理成立并不需要区间 $[a,b]$，任何一个连通的拓扑空间都可以，但是连通性的表述不是很直观，所以我们这里就不给出了.

§B.2 一元函数的微分学

接下来，我们进入微分学的部分，同样，我们先从最基本的一元函数的情况（即 $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 的函数）入手.

§B.2.1 导数与微分的定义

从近似的角度来说，*微分*或者*导数*的概念，本身在描述在某个点函数的线性近似，因此微分和导数本身也是一个（线性）映射. 在一元函数中，我们或许无法看出来这一点，但是在更加一般的微分学中，这样的观点非常重要. 因此，即便在一元部分，我们也尝试将这样的观点引入.

考虑一个函数 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，和点 $x_0\in\mathbb{R}$，我们希望找到一个线性映射 $df_{x_0}:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，使得 $f(x)$ 在 x_0 附近的行为很接近这线性映射，即

$$f(x)\approx f(x_0)+\mathrm{d}f_{x_0}(x-x_0).$$

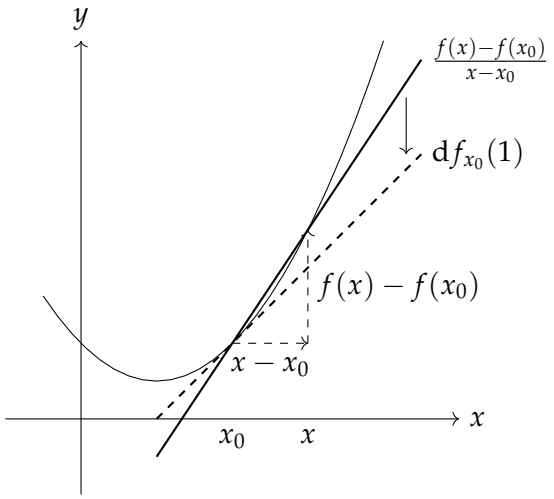
更精确来说，我们希望两边的误差是一个关于 $x-x_0$ 的高阶无穷小：

$$f(x)=f(x_0)+\mathrm{d}f_{x_0}(x-x_0)+o(x-x_0).$$

这一记号的含义可以通过一些变换看出来：

$$\mathrm{d}f_{x_0}(1)=\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}+o(1). \tag{B.1}$$

注意 $\mathrm{d}f_{x_0}(x)=kx$，所以左边就是 k，而右边是割线的斜率. 式 (B.1) 的含义其实就是说 k 就是割线斜率的极限，直观上这就是切线的斜率，这就是导数的几何含义. 这一过程可以见下图：



我们将这些讨论整理为如下定义：

定义 B.16 (微分，导数) 设 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，$x_0\in\mathbb{R}$，如果存在一个线性映射 $\mathrm{d}f_{x_0}:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，使得

$$f(x)=f(x_0)+\mathrm{d}f_{x_0}(x-x_0)+o(x-x_0),$$

则称 f 在 x_0 处**可微**或者**可导**，$\mathrm{d}f_{x_0}$ 是 f 在 x_0 处的**微分**. 微分具有形式 $\mathrm{d}f_{x_0}(x)=kx$，其中 k 称为 f 在 x_0 处的**导数**，记作 $f'(x_0)$.

如果 f 在 $\mathbb{R}$ 的每一点都可微，则称 f 是**可微**的或者**可导**的，$\mathrm{d}f$ 是 f 的**微分**，f' 是 f 的**导（函）数**，也记作 $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$ 或 $\dot{f}$.

关于导数的符号有一些注. 最能体现几何意义的是 $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$，它是由 Leibniz 发明的. 符号 d 的意思就是“微”，可以理解为无穷小的变化量，所以导数就是自变量和函数值无穷小变化量的比值. 另一方面，这个符号也可以理解为“切”，表示切向量的意思，例如 $\mathrm{d}x$ 就是沿着 x 轴的任意切向量（实际上就是正方向或者负方向），而 $\mathrm{d}y$ 就是相应地沿着 y 轴的切向量. 从这个角度来说，$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$ 就是 x 轴切向量到 y 轴切向量的一个线性映射. 因此，微分其实就是所谓的**切映射**，即切向量到切向量的映射. 这一视角在更抽象的微分学中是更本质的.

导数的定义也可以用更常见的形式给出：

命题 B.16 *设 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，$x_0\in\mathbb{R}$，那么 f 在 x_0 处可微当且仅当如下极限存在：*

$$\lim_{x\to x_0}\frac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0}.$$

这个极限就是 f 在 x_0 处的导数. 因而，微分或者说导数是唯一的.

下面我们不加证明地列举导数的一些性质，这些性质自然也导出了微分的性质.

命题 B.17 *设 $f,g:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ 在 x_0 处可微，则*

- *f 在 x_0 处连续；*
- *$(f+g)'(x_0)=f'(x_0)+g'(x_0)$；*
- *$(fg)'(x_0)=f'(x_0)g(x_0)+f(x_0)g'(x_0)$；*
- *如果 $g(x_0)\neq 0$，则*

$$\left(\frac{f}{g}\right)'(x_0)=\frac{f'(x_0)g(x_0)-f(x_0)g'(x_0)}{g(x_0)^2};$$

- *链式法则：如果 f 在 x_0 处可微，g 在 $f(x_0)$ 处可微，则 $g\circ f$ 在 x_0 处可微，且 $(g\circ f)'(x_0)=g'(f(x_0))f'(x_0)$；*

- 如果 f 存在反函数 f^{-1}，则 f^{-1} 在 $f(x_0)$ 处可微，且 $(f^{-1})'(f(x_0)) = \frac{1}{f'(x_0)}$.

在 Leibniz 记号下，如果 $z = z(y)$，$y = y(x)$，那么链式法则可以写作

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}y} \cdot \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}.$$

反函数的导数则可以写作

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}\right)^{-1}.$$

我们再次看到这种记号的天才之处，它将复杂的计算简化为了一种直观的形式.

我们指出，链式法则和反函数求导法则在微分下有更加清晰的含义：

命题 B.18 设 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 在 x_0 处可微，$g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 在 $f(x_0)$ 处可微，则

- $\mathrm{d}x = \mathrm{id}$;
- $\mathrm{d}(g \circ f)_{x_0} = \mathrm{d}g_{f(x_0)} \circ \mathrm{d}f_{x_0}$.
- 如果 f 存在反函数 f^{-1}，则 $\mathrm{d}(f^{-1})_{f(x_0)} = (\mathrm{d}f_{x_0})^{-1}$.

命题 B.18 提供了这样一种视角：微分号 d 相当于把 $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 的函数变成了另外一个 $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 的函数（即切映射），同时保持函数复合运算的单位元（id）、复合和逆元关系. 利用这一性质，我们可以用更加代数的方法研究微分（切函子），但这超出了本书的范围，我们就不再详细讨论了.

最后，我们讨论高阶导数的概念. 注意，我们只关注导数而不关注微分，这是因为由于高阶微分是一个相当抽象的概念，所以就不深入讨论了.

定义 B.17 (高阶导数) 设 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$，$x_0 \in \mathbb{R}$，如果 f 在 x_0 处可微，则 f 在 x_0 处的导数 $f'(x_0)$ 是一个实数. 如果 f' 在 x_0 处可微，则称 f 在 x_0 处**二阶可微**，此时 $f''(x_0)$ 是 f' 在 x_0 处的导数，称为 f 在 x_0 处的**二阶导数**. 一般地，如果 $f^{(n-1)}$ 在 x_0 处可微，则称 f 在 x_0 处 n **阶可微**，此时 $f^{(n)}(x_0)$ 是 $f^{(n-1)}$ 在 x_0 处的导数，称为 f 在 x_0 处的 n **阶导数**.

在 Leibniz 的记号下，n 阶导数可以写作

$$\frac{\mathrm{d}^n y}{\mathrm{d}x^n} = \underbrace{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \cdots \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}}_{n\text{个}} y.$$

从这里我们可以看出，$\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ 这个记号又仿佛是一个算子，它作用在函数上，得到一个新的函数. 这个视角在谱理论中得到发扬，继而成为了量子力学的数学基础，用它可以证明矩阵力学和波动力学的等价性. 当然，这也不在本书的讨论范围之内了.

我们将在集合 X 上 n 次连续可微的函数(即 n 阶导数是连续函数)的集合记作 $C^n(X)$，任意次连续可微的函数的集合记作 $C^\infty(X)$. 在后面更一般的微分学中，X 可以不是 $\mathbb{R}$ 的子集，但我们依然沿用此记号，如果我们讨论的映射取值不在 $\mathbb{R}$ 上，而是在抽象的集合 Y 上，我们将 $C^n(X,Y)$ 记作从 X 到 Y 的 n 次连续可微映射的集合，$C^\infty(X,Y)$ 记作任意次连续可微的从 X 到 Y 的映射的集合，这些概念的定义将在后面给出.

§B.2.2 微分学基本定理

微分学几乎都与极值联系在一起，刻画这些关系的定理就是微分学的基本定理. 我们依然只罗列定理，不给出证明. 首先我们给出极值的定义.

定义 B.18 (极大值，严格极大值，极小值，严格极小值) 设 $f: X \to \mathbb{R}$，$x_0 \in X$，如果存在包含 x_0 的开集 U，使得对任意 $x \in U$，有 $f(x) \leq f(x_0)$，则称 $f(x_0)$ 是 f 在 x_0 处的一个**极大值**，x_0 是 f 的一个**极大值点**. 如果 $f(x) = f(x_0)$ 只在 x_0 处成立，则称 $f(x_0)$ 是 f 在 x_0 处的一个**严格极大值**，x_0 是 f 的一个**严格极大值点**.

如果不等式反向，则称 $f(x_0)$ 是 f 在 x_0 处的一个**极小值**，x_0 是 f 的一个**极小值点**. 如果 $f(x) = f(x_0)$ 只在 x_0 处成立，则称 $f(x_0)$ 是 f 在 x_0 处的一个**严格极小值**，x_0 是 f 的一个**严格极小值点**.

如果 $f(x_0)$ 是 f 在 x_0 处的一个极大（小）值，则称 $f(x_0)$ 是 f 在 x_0 处的一个**极值**，x_0 是 f 的一个**极值点**.

首先是 Fermat 引理，他其实就是极值的一阶必要条件:

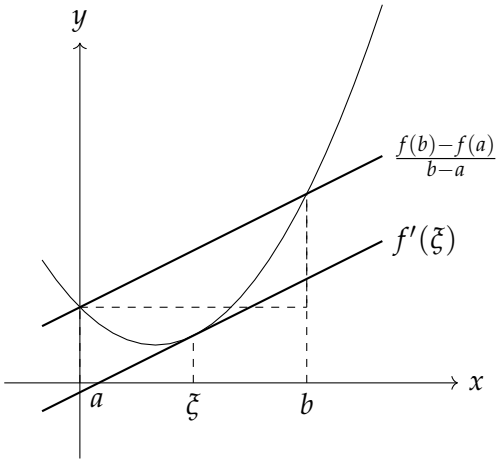
引理 B.1 (Fermat 引理) *设 $f: X \to \mathbb{R}$，$x_0 \in X$ 是 f 的一个极值点，且 f 在 x_0 处可微，则 $f'(x_0) = 0$.*

接下来是一系列中值定理，我们这里只给出 Lagrange 中值定理:

定理 B.9 (Lagrange 中值定理) *设 $f: [a,b] \to \mathbb{R}$ 是一个连续函数，且在 (a,b) 内可微，则存在 $\xi \in (a,b)$，使得*

$$f'(\xi) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

这一定理给出了割线斜率和切线斜率的关系，可以用下图来理解:



我们将在后面指出，这一定理只适用于实值函数，假如想对向量值函数使用，需要对其进行适当的修改：

定理 B.10 (Lagrange 有限增量定理) 设 $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ 是一个连续函数，且在 (a,b) 内可微，则

$$|f(b)-f(a)|\le|b-a|\sup_{\xi\in(a,b)}|f'(\xi)|.$$

接下来我们讨论高阶导数与极值的关系. 这样的关系是由 Taylor 公式给出的. 我们说过，微分是用线性函数去近似函数的过程，而 Taylor 公式则是用多项式去近似函数的过程. 考虑函数 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$，如果 f 在 x_0 处 n 次可微，我们尝试用一个 n 次多项式去近似 f，即

$$f(x)=a_0+a_1(x-x_0)+\cdots+a_n(x-x_0)^n+o((x-x_0)^n).$$

容易求出，$a_0=f(x_0)$，$a_1=f'(x_0)$，$a_2=\frac{f''(x_0)}{2}$，$a_3=\frac{f'''(x_0)}{6}$，$\cdots$，$a_k=\frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}$，因此我们得到了 Taylor 公式：

定理 B.11 设 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ 在 x_0 处 n 次可微，则

$$f(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k+o((x-x_0)^n).$$

我们将这个 n 次多项式称为 **Taylor 展开**.

利用 Taylor 展开，我们可以得到通过高阶导数判定极值的充分条件：

定理 B.12 设 $f:(a,b)\to\mathbb{R}$ 在 x_0 处 n 次可微，且 $f'(x_0)=f''(x_0)=\cdots=f^{(n-1)}(x_0)=0$，$f^{(n)}(x_0)\neq0$，则

- 如果 n 为奇数，f 在 x_0 处没有极值；
- 如果 n 为偶数，f 在 x_0 处有极值，且当 $f^{(n)}(x_0) > 0$ 时，f 在 x_0 处有严格极小值，当 $f^{(n)}(x_0) < 0$ 时，f 在 x_0 处有严格极大值.

§B.3 多元函数的微分学

这一部分讨论 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 的微分学，当 $m = 1$，我们称之为实值函数；对一般的 m，我们称之为向量值函数. 这一部分需要很多线性代数的知识，请参阅附录 A.

§B.3.1 微分、偏导数与导数的定义

沿着一元函数的思路，我们希望找到一个线性映射 $df_x : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$，使得 f 在 x 附近的行为很接近这个线性映射，而这件事情本身就可以作为微分的定义：

定义 B.19 (微分) 设 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$，$x \in \mathbb{R}^n$，如果存在一个线性映射 $\mathrm{d}f_x : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$，使得

$$f(x+h) = f(x) + \mathrm{d}f_x h + o(h),$$

则称 f 在 x_0 处**可微**或者**可导**，$\mathrm{d}f_{x_0}$ 是 f 在 x_0 处的**微分**. 这里 $o(h)$ 理解为一个向量值函数 $\alpha : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$，它满足 $\lim_{h\to 0} \|\alpha(h)\| / \|h\| = 0$[5].

如果 f 在 $\mathbb{R}^n$ 的每一点都可微，则称 f 是**可微**的或者**可导**的，$\mathrm{d}f$ 是 f 的**微分**.

现在我们来解释这一定义的含义. 微分的定义依然是将一个关于 x 的函数转变到一个关于 h 的线性映射，这个线性映射表明了函数在 x 处的线性近似，而这个线性近似的误差是一个关于 h 的高阶无穷小. 从这个角度来说，微分的定义和一元函数的情况是一样的，只不过这里的误差是一个向量值函数而已.

h 被称为**切向量**（回忆一维的情况），所有允许 h 的集合记为 $T\mathbb{R}^n_x$，称为在 x 点处的**切空间**. $\mathbb{R}^n$ 上定义的函数，切向量 h 自然可以取遍所有 $\mathbb{R}^n$ 的向量，所以其实 $T\mathbb{R}^n_x = \mathbb{R}^n$. 然而在第七章中，我们会看到，当定义域不是整个 $\mathbb{R}^n$，而只是某个子集的时候，切空间的定义就变得不平凡了. 从“切”的视角来看，微分其实是一个**切映射**，即从切向量到切向量的映射，这可以用下图来表示：

[5] 在例 B.2 中我们提到过，L^p 范数下的 $\mathbb{R}^n$ 的拓扑都是一样的. 但是，为了利用内积的性质，之后我们写出符号 $\|\cdot\|$ 的时候，都指 L^2 范数.

$$\begin{array}{ccc} f: & \mathbb{R}^n & \longrightarrow \mathbb{R}^m \\ \Big\downarrow \mathrm{d} & & \\ \mathrm{d}f_x: & T\mathbb{R}^n_x & \longrightarrow T\mathbb{R}^m_{f(x)} \end{array}$$

接下来的问题就是，如何表示线性映射 $\mathrm{d}f_x$？我们先从实值函数开始. 考虑 $\mathbb{R}^n$ 的标准正交基 $\{e_i\}_{i=1}^n$，它也是切空间 $T\mathbb{R}^n_x$ 的标准正交基，根据 Riesz 表示定理（定理 A.12），存在一个向量 g，使得

$$\mathrm{d}f_x h = \langle g, h \rangle .$$

这个向量 g 被称为 f 在 x 处的**梯度**，记作 $\operatorname{grad} f(x)$.

我们需要进一步将梯度的坐标 $(g_1, \ldots, g_n)^{\mathsf{T}}$ 求出来. 考虑一个具体的分量 e_i，根据定义，

$$f(x + te_i) = f(x) + t\mathrm{d}f_x(te_i) + o(te_i) = f(x) + g_i t + o(t).$$

因此，

$$g_i = \lim_{t \to 0} \frac{f(x + te_i) - f(x)}{t}.$$

我们给这样的导数一个名字，称为 f 在 x 对 x_i 的**偏导数**，记作 $\frac{\partial f}{\partial x_i}(x)$ 或 $\partial_i f(x)$，于是我们得到了梯度的坐标：

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(x), \ldots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(x) \right)^{\mathsf{T}}.$$

当然，我们不一定要沿着 e_i 去算导数，我们可以沿着任意单位向量 u 去算，于是我们得到了 f 在 x 处沿着 u 的**方向导数**：

$$\frac{\partial f}{\partial u}(x) = \lim_{t \to 0} \frac{f(x + tu) - f(x)}{t}, \quad \|u\| = 1.$$

有了梯度，我们可以很快算出任意方向导数：

命题 B.19 *设 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 在 x 处可微，u 是单位向量，则*

$$\frac{\partial f}{\partial u}(x) = \langle \operatorname{grad} f(x), u \rangle .$$

在微积分中，我们总是假设在标准正交基下进行计算，在这种情况下，我们有更简便的表示方式. 形式上，记

$$\nabla = e_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \cdots + e_n \frac{\partial}{\partial x_n},$$

则

$$\operatorname{grad} f(x) = \nabla f(x).$$

符号 ∇ 被称为 **nabla 算子**，它就是标准正交基下梯度的具体表示. 通常，我们会更简单地将 ∇ 记为 $(\partial_1, \dots, \partial_n)^\mathsf{T}$.

接下来我们讨论向量值函数微分的表示问题. 选取 $\mathbb{R}^m$（也就是 $T\mathbb{R}^n_x$）的标准正交基 e_i，选取 $\mathbb{R}^m$（也就是 $T\mathbb{R}^m_{f(x)}$）的标准正交基 e_i，则根据附录 A.3的讨论，我们可以用一个 $m \times n$ 的矩阵来表示 $\mathrm{d}f_x$，这个矩阵被称为 f 在 x 处的 **Jacobi 矩阵**，记作 $J_f(x)$.

下面我们计算 $J_f(x)$ 的具体表示. 假设 $f(x)$ 的坐标是 $(f_1(x), \dots, f_m(x))^\mathsf{T}$，考虑 $h \in T\mathbb{R}^n_x$，它的坐标是 $(h_1, \dots, h_n)^\mathsf{T}$，$\mathrm{d}f_x h$ 的坐标应该是

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}f_{1,x}h \\ \vdots \\ \mathrm{d}f_{m,x}h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \partial_i f_1(x) h_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n \partial_i f_m(x) h_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_1 f_1(x) & \cdots & \partial_n f_1(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_1 f_m(x) & \cdots & \partial_n f_m(x) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ \vdots \\ h_n \end{pmatrix}.$$

因此，我们得到了 Jacobi 矩阵：

$$J_f(x) = (\partial_j f_i) = \begin{pmatrix} \partial_1 f_1(x) & \cdots & \partial_n f_1(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_1 f_m(x) & \cdots & \partial_n f_m(x) \end{pmatrix}.$$

在 $m = n$ 的特殊情况下，$J_f(x)$ 的行列式被称为 f 在 x 处的 **Jacobi 行列式**，记作

$$\frac{\partial(f_1, \dots, f_n)}{\partial(x_1, \dots, x_n)}(x).$$

在例 B.15 中我们会看到，Jacobi 行列式表明了坐标变换时相应体积变化的比率. 这一事实使得它在积分学的变量替换中有着核心作用.

总结来说，实值函数的微分可以用行向量 $(\partial_1 f_1(x), \dots, \partial_n f_1(x))$ 和切向量相乘表示，而向量值函数的微分可以用 Jacobi 矩阵 $J_f(x)$ 和切向量相乘来表示，我们将这些符号统称 f 在 x 处的**导数**，记为 $f'(x)$ 或 $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)$，于是，在坐标表示下，我们可以将微分简单写作 $\mathrm{d}f_x = f'(x)\mathrm{d}x$，这里我们将 $\mathrm{d}x$ 理解为一个切向量（列向量）.

接下来，我们不加证明地列举微分的一些性质：

命题 B.20 *设 $f, g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 在 x 处可微，则*

- *f 在 x 处连续；*
- *对任意 $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$, $\mathrm{d}(\lambda_1 f_x + \lambda_2 g_x) = \lambda_1 \mathrm{d}f_x + \lambda_2 \mathrm{d}g_x$；*

- 如果 $m=1$，那么 $\mathrm{d}(f\cdot g)_x = g(x)\mathrm{d}f_x + f(x)\mathrm{d}g_x$；
- 如果 $m=1$，并且 $g(x)\neq 0$，则

$$\mathrm{d}\left(\frac{f}{g}\right)_x = \frac{1}{g(x)^2}\left(g(x)\mathrm{d}f_x - f(x)\mathrm{d}g_x\right);$$

- 如果 $m=n$，那么 $\mathrm{d}x = \mathrm{id}$；
- 链式法则：如果 f 在 x 处可微，g 在 $f(x)$ 处可微，则 $g\circ f$ 在 x 处可微，且 $\mathrm{d}(g\circ f)_x = \mathrm{d}g_{f(x)}\circ \mathrm{d}f_x$；
- 如果 f 存在反函数 f^{-1}，则 f^{-1} 在 $f(x)$ 处可微，且 $\mathrm{d}(f^{-1})_{f(x)} = (\mathrm{d}f_x)^{-1}$.

同样，最后三条说明了微分保持了复合单位元、复合和逆元关系. 而第二条则说明微分是一个函数空间（$\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$）到函数空间（$T\mathbb{R}^n_x \to T\mathbb{R}^m_{f(x)}$）的线性映射.

链式法则与反函数求导法则可以用导数写出：

$$(f\circ g)'(x) = f'(g(x))g'(x),\quad (f^{-1})'(f(x)) = (f'(x))^{-1}.$$

这里我们都将导数理解为矩阵. 同样，在 Leibniz 记号下，如果 $z=z(y)$，$y=y(x)$，那么链式法则可以写作

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}y}\cdot\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}.$$

反函数的导数则可以写作

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = \left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}\right)^{-1}.$$

他们的含义都非常清晰.

我们看几个重要的例子.

例 B.8 线性映射和线性函数本身的导数也非常简单：

$$\frac{\mathrm{d}(Ax)}{\mathrm{d}x} = A,\quad \frac{\mathrm{d}(b^{\mathsf{T}}x)}{\mathrm{d}x} = b^{\mathsf{T}}.$$

其中 A 是一个矩阵，b 是一个向量. □

例 B.9 考虑一个多元实值函数 $g(x) = f(u_1(x),\ldots,u_k(x))$，先求 f 对 $u=(u_i)$ 的导数：

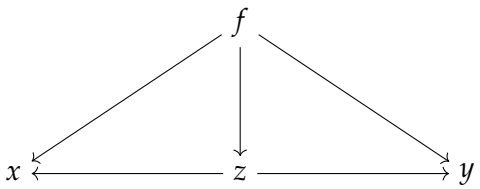
$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}u} = \left(\frac{\partial f}{\partial u_1},\ldots,\frac{\partial f}{\partial u_k}\right).$$

再求 u 对 x 的导数 $\mathrm{d}u/\mathrm{d}x = (u_1'(x), \ldots, u_k'(x))^\mathsf{T}$. 根据链式法则，

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}u} \cdot \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} = \left(\frac{\partial f}{\partial u_1}, \ldots, \frac{\partial f}{\partial u_k} \right) \begin{pmatrix} u_1'(x) \\ \vdots \\ u_k'(x) \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{k} \frac{\partial f}{\partial u_i} u_i'(x).$$

□

例 B.10 我们来看一个更复杂的例子，这个例子可以表明所谓*求导链*的意义. 考虑函数 $f(x,y,z) = z\exp(x+y)$，其中 $z(x,y) = x+y$. 我们来求 f 对 x 的偏导数. 首先，我们把变量之间的依赖关系用如下图表示出来，其中 $z \to y$ 表示 z 依赖 y.



我们要求 f 对 x 的偏导数，首先找到从 f 出发可以到达 x 的全部路径，即 $f \to z \to x$ 和 $f \to x$，然后将路径上的相邻变量的偏导数相乘再相加，即

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial x} = \exp(x+y) \cdot 1 + z\exp(x+y).$$

这里两边都出现了 $\partial f/\partial x$，但他们的含义是不同的，左边的 $\partial f/\partial x$ 是 f 对 x 这个变量的偏导数，右边的 $\partial f/\partial x$ 是 f 对第一个位置偏导数，即 $\partial_1 f$. 一个不容易引起困惑但不太直观的写法是

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \partial_3 f \cdot \partial_1 z + \partial_1 f.$$

这就是著名的**反向传播算法**的一个简单例子，它是神经网络训练中最重要的算法之一，也是很多神经网络框架优化的重点. □

例 B.11 考虑二次型 $f(x) = x^\mathsf{T} A x$（因此假设 A 是对称矩阵），我们来求 $f'(x)$. 为此，考虑一个新函数 $g(x,y) = x^\mathsf{T} A y$，则 $f(x) = g(x,x)$，于是

$$f'(x) = g'(x,x) = \partial_1 g(x,x) \cdot \frac{\partial x}{\partial x} + \partial_2 g(x,x) \cdot \frac{\partial x}{\partial x} = \partial_1 g(x,x) + \partial_2 g(x,x).$$

我们来计算 $\partial_1 g(x,x)$，$g(x,y) = (Ay)^\mathsf{T} x$，因此根据例 B.8，$\partial_1 g(x,y) = (Ay)^\mathsf{T}$，于是 $\partial_1 g(x,x) = x^\mathsf{T} A^\mathsf{T}$，同理 $\partial_2 g(x,x) = x^\mathsf{T} A$，因此 $f'(x) = x^\mathsf{T} A + x^\mathsf{T} A^\mathsf{T} = (2Ax)^\mathsf{T}$. □

注. 在求向量对向量的导数的时候，很容易搞不清楚 Jacobi 矩阵的行列顺序，一个简单的检查方法是看看导数的维度是否正确，例如我们可以试试这一个矩阵是否可以乘自变量，然后得到因变量的维数，例如例 B.11 中，如果我们求出来导数是 $2Ax$，那么 $2Axx$ 是一个无意义的量，说明我们的导数求错了，应该要进行转置.

矩阵行列如何排列其实不影响导数值，但是在进行链式法则的时候，正确的排列可以机械地写出链式法则的结果，这样才能实现自动求导器.

最后，我们讨论高阶导数的概念. 对于向量值函数来说，高阶导数是一个非常难以理解的概念，所以我们只局限在实值函数讨论这一问题.

考虑一个实值函数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，它对第 i 个坐标的偏导数是 $\partial_i f$，注意到这本身又是一个 $\mathbb{R}^n$ 到 $\mathbb{R}$ 实值函数，我们可以继续讨论它的偏导数性质，于是我们得到了**二阶偏导数**：$\partial_j(\partial_i f)$，也记为

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}, \quad \partial_{j,i} f(x).$$

一般地，我们也可以归纳定义 k 阶偏导数，这里就不再赘述.

二阶偏导数一个重要的性质是，一般情况下它可交换求偏导的顺序：

命题 B.21 *设 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 具有下列两个二阶偏导数*

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(x), \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x),$$

并且在 x 处他们都连续，则两个偏导数相等.

一个直接的推论是，对于 $C^k(X)$ 的函数来说，求 k 阶偏导数不依赖于求导的顺序.

我们来看一个重要的例子.

例 B.12 设函数 $f \in C^k(\mathbb{R}^n)$，$x, h \in \mathbb{R}^n$，考虑 $g(t) = f(x + th)$，$t \in [0, 1]$，我们来求 $g^{(m)}(t)$，其中 $m \leq k$. 先求一阶导数，根据链式法则，

$$g'(t) = \sum_{i=1}^{n} \partial_i f(x + th) h_i.$$

利用 nabla 算子，我们可以写作 $g'(t) = (h^\mathsf{T} \nabla) f$. 再求二阶导数，根据命题 B.21 和链式法则，

$$g''(t) = \sum_{i=1}^{n} h_i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\partial_i f(x + th)) = \sum_{i=1}^{n} h_i \sum_{j=1}^{n} \partial_j(\partial_i f(x + th)) h_j = \sum_{i,j=1}^{n} h_i h_j \partial_{j,i} f(x + th).$$

用 nabla 算子，我们可以写作 $g''(t) = (h^\mathsf{T} \nabla)^2 f(x + th)$. 一般地，我们有

$$g^{(m)}(t) = \sum_{i_1, \ldots, i_m} \partial_{i_m, \ldots, i_1} f(x + th) h_{i_1} \cdots h_{i_m} = (h^\mathsf{T} \nabla)^m f(x + th).$$

□

接下来，我们定义二阶导数[6]. 注意到，一个实值函数的一阶导数可以表示成一个向量值函数，即 $\operatorname{grad} f$，因此，这个向量值函数的导数就是一个矩阵. 我们将这个矩阵称为 f 的 **Hessian 矩阵**，记作 $H_f(x)$. 很容易算出，Hessian 矩阵为

$$H_f(x) = \begin{pmatrix} \partial_{1,1} f(x) & \cdots & \partial_{1,n} f(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \partial_{n,1} f(x) & \cdots & \partial_{n,n} f(x) \end{pmatrix}.$$

显然，Hessian 矩阵是一个对称矩阵，因而可以构成某个二次型. 例 B.12 中二阶导数其实已经暗示了这一点，我们可以将二阶导数写成一个二次型的形式：

$$g''(t) = h^{\mathsf{T}} H_f(x+th)h.$$

§B.3.2 微分学基本定理

类似一元函数，我们讨论极值与导数的关系，我们也不给出具体证明. 注意，一元函数的极值的定义（定义 B.18）已经包含了多元函数情形，所以这里就不再重复.

首先是 Fermat 引理的推广：

引理 B.2 (Fermat 引理) *设 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，$x_0 \in \mathbb{R}^n$ 是 f 的一个极值点，且 f 在 x_0 处可微，则 $f'(x_0) = 0$.*

接下来是一系列中值定理，我们这里依然只给出 Lagrange 中值定理：

定理 B.13 (Lagrange 中值定理) *设 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是一个实值函数，在闭区间 $[x, x+h] = \{x+th : t \in [0,1]\}$ 上连续，开区间 $(x, x+h) = \{x+th : t \in (0,1)\}$ 上可微，则存在 $\xi \in (x, x+h)$，使得*

$$f(x+h) - f(x) = f'(\xi)h.$$

用参数的形式，ξ 可以写作 $\xi = x + \theta h$，其中 $\theta \in (0,1)$.

接下来我们讨论向量值函数的中值定理. 下面的例子表明，向量值函数上中值定理不一定成立：

例 B.13 考虑匀速圆周运动，$r(t) = (\cos t, \sin t)$，它的速度向量是 $r'(t) = (-\sin t, \cos t)$. 当绕一个周期之后，位置又回到了原点，于是 $r(2\pi) - r(0) = 0$，然而 $r'(t)$ 恒不为 0，因此不存在 $\xi \in (0, 2\pi)$ 使得 $r(2\pi) - r(0) = r'(\xi)(2\pi - 0)$. □

[6] 更高阶的导数定义需要更加复杂的线性代数概念，我们这里就不引入了.

不过，中值定理的弱化版本，有限增量定理，是成立的：

定理 B.14 (Lagrange 有限增量定理) *设 $f:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$ 是一个函数，在闭区间 $[x,x+h]$ 上连续，开区间 $(x,x+h)$ 上可微，则*

$$\|f(x+h)-f(x)\|\le\|h\|\sup_{\xi\in(x,x+h)}\left\|f'(\xi)\right\|.$$

注意，这里的 $f'(\xi)$ 可能是一个矩阵，此时 $\|f'(\xi)\|$ 的含义是矩阵范数，具体的讨论参见附录 A.7.

例 B.14 这个例子探讨如何用二阶导数控制一阶导数的变化. 这一部分需要算子范数和谱理论的知识，请参阅附录 A.7.

假设 $f\in C^2(X)$，$X\subseteq\mathbb{R}^n$，那么对任意 $x,y\in X$ 满足 $[x,y]\in X$，根据定理 B.14 和 Hessian 矩阵的定义，我们有

$$\|\operatorname{grad}f(x)-\operatorname{grad}f(y)\|\le\|x-y\|\sup_{\xi\in(x,y)}\left\|H_f(\xi)\right\|.$$

我们讨论两种情况，首先假设 X 是紧集. 因为 $H_f(x)$ 连续，根据例 B.6，$\|\cdot\|$ 连续，再根据命题 B.10，$\left\|H_f(x)\right\|$ 连续. 由于 X 是紧集，根据 Weierstrass 最值定理（定理 B.7）$\left\|H_f(x)\right\|$ 在 X 上取到最大值 M，因此，我们有

$$\|\operatorname{grad}f(x)-\operatorname{grad}f(y)\|\le M\|x-y\|.$$

这一推导表明紧集上的 C^2 函数的梯度是 *Lipschitz 连续*的. 所谓 F 是 Lipschitz 连续的，指的是存在一个常数 M，使得对于任意定义域里的 x,y，我们都有 $\|F(x)-F(y)\|\le M\|x-y\|$.

在第二种情况下，假设 $X=\mathbb{R}^n$，我们使用 L^2 范数，于是根据定理 A.18，我们有

$$\|\operatorname{grad}f(x)-\operatorname{grad}f(y)\|\le\sup_{\lambda\in\sigma(H_f(z)),z\in(x,y)}|\lambda|\cdot\|x-y\|.$$

这里 $\sigma(A)$ 是矩阵 A 的谱.

因此，只要知道了 Hessian 矩阵的谱，我们就可以控制梯度的变化，这一点对于凸优化算法非常重要，具体讨论见例 8.5. □

最后，我们要讨论高阶导数与极值的关系. 首先，利用例 B.12 和一元的 Taylor 公式，我们可以得到多元函数的 Taylor 公式：

定理 B.15 (Taylor 展开) 设 $f \in C^k(U)$，$[x, x+h] \subseteq U$，那么

$$f(x+h) = \sum_{j=0}^{k} \frac{1}{j!}(h^{\mathsf{T}}\nabla)^j f(x) + o(\|h\|^k).$$

根据这一定理，我们可以得到二阶导数判定极值的充分条件：

定理 B.16 设 $f \in C^2(U)$，U 是开集，$x_0 \in U$ 且 $f'(x_0) = 0$，则

- 如果 $H_f(x_0)$ 是正定的，则 f 在 x_0 处取极小值；
- 如果 $H_f(x_0)$ 是负定的，则 f 在 x_0 处取极大值；
- 如果 $H_f(x_0)$ 不定（既非半正定也非半负定），则 f 在 x_0 处不取极值.

§B.3.3 隐函数定理

微积分中，还有一类非常重要的问题，那就是解方程，我们看一个非常简单的例子. 设 $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$，$f(x,y) = x^2 + y^2 - 1$，我们来求解方程 $f(x,y) = 0$，也就是求单位圆的方程. 由于 f 是一个二次型，因此我们可以直接求出它的根：

$$y = \pm\sqrt{1 - x^2}.$$

比如考虑圆周上的点 $(0.6, 0.8)$ 的附近，x 就可以把 y 表示出来：$y = \sqrt{1-x^2}$. 如果考虑点 $(0.6, -0.8)$ 的附近，我们也可以写出 $y = -\sqrt{1-x^2}$.

总而言之，只要给定圆周上一个点 (x_0, y_0) $(y_0 \neq 0)$，我们就可以找到一个邻域，在这个邻域上确认一个 y 和 x 的函数关系 $y = y(x)$.

更一般地，给定函数方程 $F(x,y) = 0$，它确定了一个平面上的曲线 $C = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : F(x,y) = 0\}$. 任取一点 $(x_0, y_0) \in C$，如果在 (x_0, y_0) 的某个邻域 U 上，我们可以确认一个 y 和 x 的函数关系 $y = y(x)$，使得 $U \cap C$ 中的所有点都可以用这个关系表示，那么我们其实就把一个隐藏在 $F(x,y) = 0$ 中的函数 y 解出来了，这就是**隐函数**的概念.

下面，我们考虑维数更高的情况. 设 $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^k$，$F(x,y) = 0$，其中 $x \in \mathbb{R}^n$，$y \in \mathbb{R}^m$. 任取一点 (x_0, y_0) 满足 $F(x_0, y_0) = 0$，同样，我们希望在 (x_0, y_0) 的某个邻域 U 上，将 $F(x,y) = 0$ 转化为一个等价的函数关系 $y = y(x)$.

首先我们指出，在一般情况下，$k = m$ 的时候讨论才有意义，这可以从线性方程组的理论看出，相关的线性代数理论可以参见附录 A. 假如说 $F(x,y) = 0$ 就是一个线性方程组：

$$\begin{aligned} &a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n + b_{11}y_1 + \cdots + b_{1m}y_m - c_1 = 0, \\ &\cdots \\ &a_{k1}x_1 + \cdots + a_{kn}x_n + b_{k1}y_1 + \cdots + b_{km}y_m - c_k = 0. \end{aligned} \tag{B.2}$$

我们也可以写成矩阵形式：

$$Ax + By = c.$$

其中 A 是一个 $k \times n$ 的矩阵，B 是一个 $k \times m$ 的矩阵，c 是一个 k 维向量.

如果 $k < m$，那么线性映射 $y \mapsto By$ 的秩是 $k < m$，根据推论 A.1，这个映射的核不是 $\{0\}$，所以对于任意一个满足 $Ax_0 + By_0 = c$ 的 (x_0, y_0) 来说，总可以再加上一个 $y \neq 0$ 使得 $Ax_0 + B(y + y_0) = c$ 且 $\|y\|$ 充分小. 因此对任何 x_0，都找不到一个 y 的邻域，其中有唯一的 y 使得 $Ax_0 + By = c$，所以我们也不能解出 $y = y(x)$.

如果 $k > m$，那么 $F(x, y) = 0$ 很有可能是空集. 比如，下列线性方程组就没有解：

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 0, \\ x_1 + x_2 &= 1. \end{aligned}$$

对于非线性方程组的情况，如果 $F(x, y)$ 是可微的，那么在一个点的局部函数的性质可以用线性映射近似，于是也应该有 $k = m$. 这一事实可以简单归结为：*要解 m 个未知数（即 y），应该恰好有 m 个方程（即 $F(x, y) = 0$）*.

我们继续来看线性方程组的情况，即 (B.2)，如果 $k = m$，$c = 0$，B 可逆，很快就可以解出

$$y = -B^{-1}Ax.$$

对于一般的 F，在它的每一个局部，我们都可以用一个线性映射近似，根据微分的偏导数表示，这一线性映射恰好形如

$$\underbrace{\frac{\partial F}{\partial x}}_{A} h_x + \underbrace{\frac{\partial F}{\partial y}}_{B} h_y.$$

这里 h_y 和 h_x 就应该理解为映射在这一点的切向量. 于是，假如 $\frac{\partial F}{\partial y}$ 可逆，那么我们就可以解出

$$h_y = -\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial x} h_x.$$

假设我们可以解出函数关系 $y = f(x)$，由于 h_x 和 h_y 是切向量，根据导数的定义，

$$f'(x) = -\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial x}.$$

确定了导数就可以确定这个函数本身，这就是**隐函数定理**的内容. 下面，我们正式给出它的陈述.

定理 B.17 (隐函数定理) 设 $F : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$，$F(x,y) = 0$，其中 $x \in \mathbb{R}^n$，$y \in \mathbb{R}^m$，考虑点 (x_0, y_0) 的邻域 U，如果：

- $F \in C^p(U; \mathbb{R}^m)$，$p \geq 1$；
- $F(x_0, y_0) = 0$；
- $\frac{\partial F}{\partial y}(x_0, y_0)$ 可逆，

那么存在开球 $B(x_0, r) \subseteq \mathbb{R}^n$，开球 $B(y_0, s) \subseteq \mathbb{R}^m$，以及一个函数 $f \in C^p(B(x_0, r); \mathbb{R}^m)$，使得对任意 $x \in B(x_0, r)$，$y \in B(y_0, s)$，都有

$$F(x,y) = 0 \iff y = f(x).$$

此外，f 的导数可以用 F 的偏导数表示：

$$f'(x) = -\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial x}.$$

用 Banach 不动点定理（定理 8.1），我们可以给一个该定理的简洁证明，具体内容请参见第八章的习题**??**.

隐函数定理的一个特例是向量值函数的反函数的存在性定理：

定理 B.18 (反函数定理) 设 $f \in C^p(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}^n)$，$p \geq 1$，$f'(x_0)$ 可逆，那么存在 x_0 的邻域 V，以及 $f(x_0)$ 的邻域 W，使得 $f : V \to W$ 是一个双射，且 $f^{-1} \in C^p(W; \mathbb{R}^n)$，此外，$f^{-1}$ 的导数可以用 f 的导数表示，对于 $x \in V, y = f(x) \in W$，我们有

$$f^{-1}(y)' = (f'(x))^{-1}.$$

作为一个注，反函数定理中可逆性的判断可以利用 Jacobi 行列式是否非零来判断.

反函数定理最重要的用途是坐标变换. 我们之前的坐标变换都是线性的基到线性的基，然而在微积分中非线性的坐标也非常常用，比如极坐标、球坐标等. 这些坐标变换都是非线性的，因此我们需要反函数定理来处理这些坐标变换. 我们考虑极坐标的例子.

例 B.15 (极坐标) 考虑一个半平面 $\mathbb{R}_{\geq 0} \times \mathbb{R} = \{(r, \phi) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} : r \geq 0\}$. 我们将它映射到 $\mathbb{R}^2$ 平面上，映射 f 定义为 $f(r, \phi) = (r\cos\phi, r\sin\phi)$. 我们也可以写得更像坐标变换一些：

$$x = r\cos\phi,$$
$$y = r\sin\phi.$$

这个变换的 Jacobi 行列式是 r，因此除了 $r=0$ 的点，这个变换都是可逆的，于是在 $\mathbb{R}^2$ 的任何局部上，我们都可以用极坐标来表示平面上的点.

我们借着这个例子来看一下 Jacobi 行列式的几何意义. 上述坐标变换的微分是：

$$\begin{pmatrix} \mathrm{d}x \\ \mathrm{d}y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -r\sin\phi \\ \sin\phi & r\cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{d}r \\ \mathrm{d}\phi \end{pmatrix} = J_f \begin{pmatrix} \mathrm{d}r \\ \mathrm{d}\phi \end{pmatrix}.$$

这里对诸如 $\mathrm{d}x$ 的符号，我们有两种理解方式，一种是把他们理解为切向量，另一种是把他们理解为一段微小位移. 不论哪一种，最终结果都是将 f 在局部近似为了一个线性映射. 根据附录 A.6 的讨论，这一线性映射将平行体 $\Pi(\mathrm{d}r, \mathrm{d}\phi)$ 映射为平行体 $\Pi(\mathrm{d}x, \mathrm{d}y)$，而 Jacobi 行列式就是他们有向体积变化的比率. 如果我们把 $\Pi(\mathrm{d}r, \mathrm{d}\phi)$ 的有向体积记为 $\partial(r,\phi)$，那么我们有

$$\frac{\partial(x,y)}{\partial(r,\phi)} = \det J_f.$$

这正是 Jacobi 行列式这一符号的意义.

我们还可以用 Leibniz 的记号更加形象地表达这件事情. 作为坐标，我们认为 $\mathrm{d}x\mathrm{d}y$ 表示的正好就是长方形 $\Pi(\mathrm{d}x, \mathrm{d}y)$ 的有向面积（长乘宽），而 $\mathrm{d}r\mathrm{d}\phi$ 表示的正好就是长方形 $\Pi(\mathrm{d}r, \mathrm{d}\phi)$ 的有向面积，于是我们有

$$\frac{\mathrm{d}x\mathrm{d}y}{\mathrm{d}r\mathrm{d}\phi} = \frac{\partial(x,y)}{\partial(r,\phi)} \iff \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{\partial(x,y)}{\partial(r,\phi)}\mathrm{d}r\mathrm{d}\phi.$$

在积分学中，这一符号（再加上绝对值）实际上直接给出了变量替换的公式. □

附录 C　概率论基础

本附录主要介绍 Kolmogorov 概率论，讨论只局限在数学层面，不涉及概率论的哲学讨论. 本附录的连续型随机变量（向量）的讨论需要微积分的基本知识，关于微分学的部分，可以参见附录 B；积分学（主要是 Lebesgue 积分）我们会在附录 C.3 以数学期望的形式介绍.

§C.1　从朴素概率论到公理化概率论

§C.1.1　Kolmogorov 概率论

朴素的概率论通常讨论两种极端的情况，一个是可以用数数的方式来计算概率的情况，比如说掷骰子，另一个是用面积的方式来计算概率的情况，比如在随机选一个圆周上的点. 这两个情况分别对应了*古典概型*和*几何概型*.

我们先给一些术语. 考虑一个随机试验，它的所有可能结果组成的集合称为**样本空间**，记为 Ω. 样本空间的元素称为**样本点**，通常记为 ω. 样本空间的*某些*子集被称为**事件**. 我们来看看这些概念在朴素的概率论中都具体是什么.

例 C.1 (古典概型) 先后掷两个骰子，样本空间为

$$\Omega = \{(i,j) : 1 \leq i,j \leq 6\}.$$

样本点 (i,j) 表示第一个骰子掷出 i 点，第二个骰子掷出 j 点.

“第一个骰子掷出 i 点”这个事件可以表示为 $A_i = \{(i,j) : 1 \leq j \leq 6\}$. “第一个骰子掷出 i 点，第二个骰子掷出 j 点”这个事件可以表示为 $B_{ij} = \{(i,j)\}$. □

例 C.2 (几何概型) 在圆周上随机选点. 如果用弧度来表示圆周上的点，那么样本空间为

$$\Omega = [0, 2\pi).$$

样本点为 ω，表示选出点的弧度.

事件 $A = [0, \pi)$ 表示选出了上半圆周，事件 $B = [0, \pi/2) \cup [\pi, 3\pi/2)$ 表示选出了右上或左下的 $1/4$ 圆周. □

那么，如何定义概率呢？朴素地说，概率是某个事件出现的可能性占总可能的比例.

对于古典概型，我们简单认为每个样本点出现的概率都是相同的，也就是说，如果用 p_ω 表示样本点 ω 出现的概率，那么对任意 $\omega \in \Omega$，都有 $p_\omega = 1/|\Omega|$. 于是，对于任意事件 A，它发生的概率为

$$\sum_{\omega \in A} p_\omega = \frac{|A|}{|\Omega|}.$$

例如在上面掷骰子的例子中，$p_\omega = 1/36$，A 发生的概率为 $1/6$，B 发生的概率为 $1/36$.

对于几何概型，不能再用古典概型的方式定义概率. 一段长为 2π 的圆弧上，有不可数个点. 如果选到每个点的概率相等，那么这个概率必须是 0，否则所有点的概率和是无穷大. 更麻烦的是，我们也不能用古典概型的方式计算某个事件的概率！例如，选到上半圆周的概率，就是把所有上半圆周上的点的概率加起来，任意多个 0 相加依然还是 0，所以这样的定义出来的概率永远是零，这样是不可行的.

朴素的直觉告诉我们，选到上半圆周的概率是 $1/2$，因为上半圆周刚好占了半个圆周. 所以几何概型的概率定义利用了体积的概念. 事件 A 的概率定义为

$$\frac{\text{事件 } A \text{ 对应的体积}}{\text{样本空间 } \Omega \text{ 对应的体积}}.$$

这里体积是广义上的，一维集合的体积就是长度，二维集合的体积就是面积，三维集合的体积就是体积，以此类推.

例如在上面圆周的例子中，A 对应的体积（长度）为 π，Ω 对应的体积（长度）为 2π，所以 A 发生的概率为 $1/2$. 同理，B 的概率也是 $1/2$.

几何概型的定义看似合理，却并不严谨：我们并不知道如何定义“体积”. 我们来看一个有趣的例子.

例 C.3 (Bertrand 悖论) 考虑一个圆，它的半径为 1. 现在我们随机地在圆上取一个弦，那么这个弦的长度超过 $\sqrt{3}$（即圆内接正三角形的边长）的概率是多少？

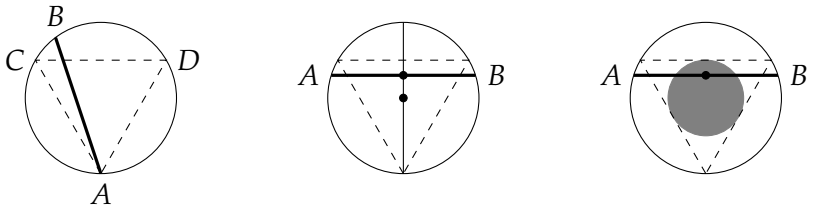
我们给出三种答案，这三种答案对应了我们对“随机”的不同理解.

解答 1. 不妨固定弦的其中一个点 A，另一个点 B 在圆上等可能选取. 以 A 为顶点作圆内接正三角形 ACD，弦的长度超过 $\sqrt{3}$ 等价于 B 在弧 CD 上，所以概率为 $1/3$.

解答 2. 弦长只与它到圆心的距离有关系，与方向无关. 弦长超过 $\sqrt{3}$ 等价于它到圆心的距离小于 $1/2$，所以概率为 $1/2$.

解答 3. 弦被它的中点唯一确定，弦长大于 $\sqrt{3}$ 等价于中点落在一个半径为 $1/2$ 的同心小圆内，所以概率为同心小圆面积比上大圆面积，即 $(1/2)^2 = 1/4$.

三种解答的示意图见下（从左到右分别是解答 1 到 3）：



□

同样的事件因为我们对“随机”的理解不同，得到了不同的概率！因此，我们需要一个更加严格的定义来描述概率.

首先注意到，概率应该是一个函数，它的值域是 $[0,1]$. 那么，它的定义域应该是什么呢？我们已经看到，概率应该定义在事件上，而非样本点上. 那么，概率可以定义在任意事件上吗？这个问题很微妙，我们不在这里讨论. 这里只是指出，我们关心的并不总是任意事件，而是一类被 σ-代数所刻画的事件.

定义 C.1 (σ-代数) 设 Ω 是一个集合，$\mathscr{F}$ 是 Ω 的子集的集合. 如果 $\mathscr{F}$ 满足

1. $\Omega \in \mathscr{F}$;
2. 如果 $A \in \mathscr{F}$，则 A 的补集 $\Omega \setminus A \in \mathscr{F}$;
3. 如果 $A_1, A_2, \ldots \in \mathscr{F}$，则 $\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathscr{F}$.

则称 $\mathscr{F}$ 是 Ω 上的一个 **σ-代数**.

在样本空间中，我们要求事件也形成一个 σ-代数，这样的 σ-代数称为**事件域**，记为 $\mathscr{F}$. 在数学上，σ-代数包括了绝大部分我们可以构造的事件，这是因为，容易验证，σ-代数中的事件对可数交、可数并和补运算都是封闭的，并且包含了样本空间和空集. 关于这一定义的哲学讨论，可以见第一章.

样本空间连同它的事件域，被称为可测空间.

定义 C.2 (可测空间) 设 Ω 是一个集合，$\mathscr{F}$ 是 Ω 上的一个 σ-代数. 则称 $(\Omega, \mathscr{F})$ 是一个**可测空间**.

设 $S \subseteq \Omega$，如果 $S \in \mathscr{F}$，则称 S 是 **$\mathscr{F}$-可测**的.

定义可测空间与 $\mathscr{F}$-可测的概念，主要是为了区分一个集合到底是不是我们所关心的事件，我们只关心 $\mathscr{F}$-可测的集合.

接下来，我们给出 Kolmogorov 概率论的公理化定义.

定义 C.3 (概率空间，概率测度) 设 $(\Omega, \mathscr{F})$ 是一个可测空间. 如果函数 $\Pr : \mathscr{F} \to [0,1]$ 满足

1. 正则性：$\Pr(\Omega) = 1$;
2. 可列可加性：如果 $A_1, A_2, \cdots \in \mathscr{F}$ 是两两不相交的事件，则

$$\Pr\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \Pr(A_i),$$

则称 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个**概率空间**，$\Pr$ 称为**概率测度**或**概率**.

容易证明，概率有如下性质：

命题 C.1 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，则：

1. $\Pr(\varnothing) = 0$;
2. 单调性：对任意的 $A, B \in \mathscr{F}$，如果 $A \subseteq B$，则 $\Pr(A) \leq \Pr(B)$;
3. 有限可加性：对两两不相交的 $A_1, A_2, \ldots, A_n \in \mathscr{F}$，有

$$\Pr\left(\bigcup_{i=1}^{n} A_i\right) = \sum_{i=1}^{n} \Pr(A_i).$$

他们的证明都不困难，我们略去.

下面，我们回到古典概型与几何概型，看看如何对他们构造概率空间.

对于古典概型来说，我们容易写出它的概率空间. 此时事件域恰好为所有 Ω 的子集的集合，概率测度的定义也就是我们之前的定义：$\Pr(A) = |A|/|\Omega|$.

对于几何概型来说，概率空间最大的困难在于事件域和概率测度的定义. 为了简化讨论，我们集中在 $\Omega = [0,1]^n$，也就是 n 维立方体的情况.

先考虑事件域. 首先，事件域至少要包含长方体

$$\prod_i (a_i, b_i) = \{x = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n : a_i < x_i < b_i\}.$$

这是我们可以构造的最基本的集合了. 我们就定义事件域为包含所有长方体的最小 σ-代数 $\mathscr{B}([0,1]^n)$. 换言之，如果还有一个 σ-代数 $\mathscr{F}$ 包含所有长方体，那么 $\mathscr{B}([0,1]^n) \subseteq \mathscr{F}$.

我们将这一 σ-代数称为 **Borel 代数**. Borel 代数包含了绝大部分我们要讨论的集合，例如开集、闭集、单点集、有限集、可数集等，可以简单归纳为“合理的集合”.

事件域的定义已经给出，我们还需要定义概率测度 Pr，它应该满足以下两个要求：

- 让正方体的概率等于它的体积. 按照朴素的直觉，长方体 $\prod_i (a_i, b_i)$ 的体积应该是 $\prod_i (b_i - a_i)$，也就是
$$\Pr\left(\prod_i (a_i, b_i)\right) = \prod_i (b_i - a_i).$$
- 平移不变性. 也就是说，如果 $A \in \mathscr{B}([0,1]^n)$，那么对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$，定义 $A + x = \{y \in \mathbb{R}^n : y = x + z, z \in A\}$，只要 $A \in \mathscr{B}([0,1]^n)$，就有 $\Pr(A + x) = \Pr(A)$.

一个惊人的事实是，这样的概率测度是存在且唯一的，我们称之为 **Lebesgue 测度**，常记为 λ.

注意，Borel 代数和 Lebesgue 测度的定义可以不局限在 $[0,1]^n$，他们可以定义在与实数相关的各种集合上. 在本附录中，我们最主要是用的是 $\mathbb{R}^n$ 上的相关定义，例如 $\mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$ 就是包含所有 n 维开长方体（每条边是开区间）的最小 σ-代数，λ 就是定义在 $\mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$ 上的 Lebesgue 测度. $\mathbb{R}^n$ 上的 Lebesgue 测度其实是概率测度的扩展（而非概率测度），因为此时不再要求有正则性（即 $\lambda(\Omega) = 1$），但额外要求 $\lambda(\varnothing) = 0$.

§C.1.2 条件概率，独立性

接下来，我们讨论条件概率与独立性. 我们还是看掷两个骰子的例子. 掷完第一个骰子，我们马上观察结果，然后再掷第二个骰子. 问第一个骰子是 i，第二个是 j 的概率是多少？如果继续套用原来的概率空间，很快就会觉得不对劲. 此时，第一个骰子的结果完全没有随机性！所以朴素的直觉告诉我们，这里的概率应该有另一个依赖于第一次投骰子结果的定义，这样的概率就是*条件概率*.

我们直接给出一般情况下条件概率的定义.

定义 C.4 (条件概率) 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$A, B \in \mathscr{F}$ 是两个事件，且 $\Pr(A) > 0$. 则称
$$\Pr(B|A) = \frac{\Pr(A \cap B)}{\Pr(A)}$$
是事件 B 在事件 A 发生的条件下发生的**条件概率**.

以上定义要求 A 发生概率为正，然而，A 是零概率的时候也是可能有条件概率的. 例如，从 $[0,1] \times [0,1]$ 中均匀地随机选一个点 (X, Y)，观察它的横坐标 X. 不管什么样的

x，$X = x$ 的概率都是 0. 然而，直觉上，条件在 $X = x$ 上，$Y > 1/2$ 的概率不仅存在，而且应该是 $1/2$. 在附录 C.2 中，我们会针对一类特殊的事件，给出此时条件概率的定义.

我们继续看投两个骰子的例子. 假设事件 A 是“第一个骰子是 i“，事件 B 是“第二个骰子是 j”. 我们可以计算出 $\Pr(B|A) = \Pr(B) = 1/6$. 如果单看计算的结果，这是一个非常神奇的式子：条件在 A 上和不条件在 A 上概率是一样的！从直觉来说，这件事情却并不神秘，因为第一个骰子的结果和第二个骰子的结果是不应该有关系的. 我们把这种现象称为**独立性**. 更一般地，对任意事件 A, B，如果 $\Pr(A) > 0$，那么

$$\Pr(B|A) = \Pr(B) \iff \frac{\Pr(A \cap B)}{\Pr(A)} = \Pr(B) \iff \Pr(A \cap B) = \Pr(A)\Pr(B).$$

最后一个式子并不要求 $\Pr(A) > 0$，因此我们用它作为独立性的定义，这样定义可以不依赖条件概率.

定义 C.5 (独立性) 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$A, B \in \mathscr{F}$ 是两个事件. 如果 $\Pr(A \cap B) = \Pr(A)\Pr(B)$，则称事件 A 和 B **相互独立**.

一般地，给定一个事件族 $\mathscr{A} \subseteq \mathscr{F}$，如果对任意的有限个不同的 $A_1, A_2, \ldots, A_n \in \mathscr{A}$，都有

$$\Pr\left(\bigcap_{i=1}^{n} A_i\right) = \prod_{i=1}^{n} \Pr(A_i),$$

则称事件族 $\mathscr{A}$ 中的事件是**相互独立**的.

我们在定义中还给出了多个事件相互独立的定义，这一定义是说不管挑出其中多少有限个事件，他们都应该满足交的概率等于概率的积. 这并不等价于任意两个事件都相互独立，我们看下面的例子.

例 C.4 两个人进行石头剪刀布游戏，每个人独立等概率地出剪刀石头布.

考虑下面三个事件：$A = \{\text{甲出了石头}\}$，$B = \{\text{乙出了剪刀}\}$，$C = \{\text{甲赢}\}$.

容易算出，$\Pr(A \cap B) = \Pr(A)\Pr(B) = 1/9$，$\Pr(A \cap C) = \Pr(A)\Pr(C) = 1/9$，$\Pr(B \cap C) = \Pr(B)\Pr(C) = 1/9$，所以 A, B, C 两两独立.

但是 A, B, C 不是相互独立的：$\Pr(A \cap B \cap C) = 1/9 \neq 1/27 = \Pr(A)\Pr(B)\Pr(C)$.□

这个例子说明，三个事件的独立性远比他们任意两个之间的独立性要复杂，三个事件放在一起可能才会出现不独立的情况. 对于一般情况，这样的现象更加普遍，所以我们多个事件的独立性定义是要求任意有限个事件都独立，而不是任意两个事件都独立.

最后，我们给出条件概率的一些性质.

命题 C.2 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，那么

1. 对任意 $A \in \mathscr{F}$ 满足 $\Pr(A) > 0$，$\Pr(\cdot|A)$ 也是一个概率测度；

2. $\Pr(\cdot|\Omega) = \Pr(\cdot)$，

3. 对任意 $A \in \mathscr{F}$ 满足 $\Pr(A) > 0$，$\Pr(A|A) = 1$.

以上性质的证明都很简单，我们就不给出了.

接下来我们给两个在 Bayes 概率论以及随机过程中很重要的性质.

定理 C.1 (全概率公式) 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$A_1, A_2, \ldots \in \mathscr{F}$ 是一列两两不相交的事件，且 $\Pr(A_i) > 0$，$\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i = B$，则对任意的 $C \in \mathscr{F}$，有

$$\Pr(C|B) = \sum_{i=1}^{\infty} \Pr(C|A_i) \Pr(A_i).$$

特别地，对于有限个 A_i，这一定理也成立.

证明. 注意到

$$\Pr(C) = \Pr(C \cap B) = \Pr\left(C \cap \bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \Pr\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} (C \cap A_i)\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \Pr(C \cap A_i).$$

最后一个等号是因为 $C \cap A_i$ 两两不相交. 另一方面，

$$\Pr(C \cap A_i) = \Pr(C|A_i) \Pr(A_i),$$

所以

$$\Pr(C) = \sum_{i=1}^{\infty} \Pr(C|A_i) \Pr(A_i).$$

对于有限个 A_i，只需要把无穷求和改成有限求和，利用有限可加性即可. □

全概率公式是一种分而治之的思想，它把一个复杂的事件分解成若干个简单的事件，然后再把简单的事件的概率加起来. 我们来看一个例子.

例 C.5 从装有 w 个白球和 b 个黑球的盒子中随机地取出一个球，不放回，再取出一个球. 问第二个球是白球的概率是多少?

设事件 A 是“第一个球是白球”，事件 B 是“第二个球是白球”. 我们有

$$\begin{aligned}\Pr(B) &= \Pr(B|A) \Pr(A) + \Pr(B|\bar{A}) \Pr(\bar{A}) \\ &= \frac{w-1}{w+b-1} \cdot \frac{w}{w+b} + \frac{w}{w+b-1} \cdot \frac{b}{w+b} \\ &= \frac{w}{w+b}.\end{aligned}$$

这里 $\bar{A}$ 指的是 A 的补集，即“第一个球是黑球”. □

定理 C.2 (贝叶斯公式) 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$A, B \in \mathscr{F}$ 且 $\Pr(A), \Pr(B) > 0$，则

$$\Pr(A|B) = \frac{\Pr(B|A)\Pr(A)}{\Pr(B)}.$$

这一公式的证明几乎是显然的，我们略去.

一个特别重要的推论被称为链式法则，它是 *Bayes* 网络的基础.

推论 C.1 (链式法则) 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$A_1, A_2, \ldots, A_n \in \mathscr{F}$，且 $\Pr(A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_n) > 0$，则

$$\begin{aligned}&\Pr(A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_n)\\ =&\Pr(A_1)\Pr(A_2|A_1)\Pr(A_3|A_1 \cap A_2)\cdots\Pr(A_n|A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_{n-1}).\end{aligned}$$

我们也看一个例子.

例 C.6 (Pólya 的罐子) 一个罐子装有 w 个白球和 b 个黑球，随机取出一个，观察它的颜色，放回，再放回相同颜色的 c 个球，再随机取一次，重复上述操作，如此反复 n 次，问每一次都取到白球的概率是多少?

设事件 A_i 是“第 i 次取出的球是白球”. 我们有

$$\begin{aligned}\Pr(A_1) &= \frac{w}{w+b},\\ \Pr(A_2|A_1) &= \frac{w+c}{w+b+c},\\ \Pr(A_3|A_1 \cap A_2) &= \frac{w+2c}{w+b+2c},\\ &\cdots\\ \Pr(A_n|A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_{n-1}) &= \frac{w+nc}{w+b+nc}.\end{aligned}$$

所以

$$\Pr(A_1 \cap A_2 \cap \cdots \cap A_n) = \frac{w}{w+b} \cdot \frac{w+c}{w+b+c} \cdots \frac{w+nc}{w+b+nc}.$$ □

注. 在概率论中，我们经常要讨论事件的交，所以我们通常会把 $A \cap B$ 简记为 AB. 此外，事件不相交我们也称之为**互斥**. 事件 A 的补事件，即 $\Omega \setminus A$. 我们会记为 $\bar{A}$ 或 A^c.

另外，我们也经常要讨论一个关于 ω 的陈述 $Q(\omega)$ 定义的事件 $\{\omega \in \Omega : Q(\omega)\}$，在 Pólya 的罐子的例子中，事件 A_1 其实就是由陈述 $Q(\omega)$: “ω 中第一次取出的球是白球”定义的事件. 在这种情况下，我们将这一事件简记为 $\{Q\}$，它的概率就是 $\Pr(\{Q\})$ 或者简记为 $\Pr(Q)$.

最后，事件交的概率也经常以逗号的形式写出. 例如，在 Pólya 的罐子的例子中，我们

会把概率 $\Pr(A_1A_2)$ 记为

$$\Pr(\text{第一次取出的球是白球}, \text{第二次取出的球是白球}).$$

这样的记号更直观，并且在随机变量部分会经常使用.

§C.2 随机变量，分布函数

接下来，我们讨论随机变量. 从某种意义上说，随机变量是另一种刻画概率测度的手段. 不过，随机变量能够更加直观、定量描述概率空间中的事件，所以这是一个更加容易使用的概念.

§C.2.1 基本定义

为了理解随机变量的概念，我们依然从古典概型入手.

例 C.7 继续考虑先后投两个骰子的情况，假设它的概率空间是 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$，他们的定义我们在附录 C.1.1 的末尾已经讨论过了.

我们可以定义一个从样本空间 Ω 到 $\mathbb{N}$ 的函数 $S(i,j) = i + j$，也就是两个点数的和. 我们来看看 S 与事件域的关系. $\{S = s\} = \{(i,j) \in \Omega : i + j = s\}$，所以 S 将原本的事件精简成了一个数字. 这个过程丢弃了一些事件，例如 S 无法表达事件 $\{(1,2)\}$，实际上，它无法区分 $(1,2)$ 和 $(2,1)$，它把这两个样本点都看成了 3. 但是，S 仍然保留了很多信息，例如，S 可以区分事件 $\{(1,1)\}$ 和 $\{(2,2)\}$，它们分别对应 2 和 4. 总结来说，S 将原本更精细的事件域压缩成了更粗糙的事件域.

有了上面的感觉，我们可以看一个更抽象的函数. 定义一个从样本空间 Ω 到 $\mathbb{N}^2$ 的函数 X，它的定义为 $X(i,j) = (i,j)$. 换句话说，它把样本点看成一个 $\mathbb{N}^2$ 的元素. $\mathscr{F}$ 中的所有事件都可以表达为 $\{X \in B\}$，$B \subseteq \mathbb{N}^2$. 所以 X 完全刻画了整个事件域. □

上面例子中的 S 和 X 都是*随机变量*的例子. 我们给出随机变量的定义.

定义 C.6 (随机变量，随机向量，Borel 函数) 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$X : \Omega \to \mathbb{R}$ 是一个函数. 如果对任意的 $x \in \mathbb{R}$，$\{X \in \mathscr{B}(\mathbb{R})\} \in \mathscr{F}$，则称 X 是一个**随机变量**.

一般地，考虑一个集合 $\mathbb{R}^n$ 以及其上的 Borel 代数 $\mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$，$X : \Omega \to \mathbb{R}^n$ 是一个映射. 如果对任意的 $A \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$，集合 $\{X \in A\}$ $\mathscr{F}$-可测，即 $\{X \in A\} \in \mathscr{F}$，则称 X 是一个 n **维随机向量**，简称**随机向量**. 如果 $(\Omega, \mathscr{F}) = (\mathbb{R}^m, \mathscr{B}(\mathbb{R}^m))$，则称 X 是一个 **Borel 函数**.

下面对这个定义做一些说明. 首先，随机变量是一个映射，而不是一个数字，这一点经常会被人误解. 直观上说，随机变量的值是随机的，这个随机性是因为背后有一个未知的力量在抛硬币，我们把从抛硬币到观测值这一整个东西称之为随机变量.

定义的后面还涉及了 σ-代数相关的东西，我们也给一个简要说明. Borel 代数包含了“合理的集合”，所以 $\{X \in B\}$（$B \in \mathscr{B}(\mathbb{R})$）表示事件“$X$ 落在合理的值集上”. 随机变量的要求其实就是，“X 落在合理的值集上”是一个我们可以定义概率（即可测）的事件.

我们下面讨论一些随机变量的基本性质.

定理 C.3 *设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$X : \Omega \to \mathbb{R}^n$ 是一个随机向量，$g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 是一个 Borel 函数，则 $g(X) = g \circ X$ 也是一个随机向量.*

这一性质告诉我们了一种构造随机变量的方式：对一个随机变量进行一些 Borel 函数的操作. 下面的性质告诉我们，Borel 函数包含了绝大部分我们关心的函数，因此在实际中，我们不需要担心一个映射作用完之后是否还是随机变量.

命题 C.3 *下面函数是 Borel 函数：*

1. *所有的连续函数；*
2. *给定 $A \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$，示性函数 $I_A(x) = \begin{cases} 1, & x \in A, \\ 0, & x \notin A. \end{cases}$*
3. *两个 Borel 函数的复合函数.*

接下来，我们进入分布函数的讨论. 我们说过，随机变量某种意义上给出了概率测度的另一种刻画方式，而这一桥梁就是由分布函数给出的.

考虑概率空间 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$，以及一个随机变量 $X : \Omega \to \mathbb{R}$. 要刻画概率测度 $\Pr$，我们需要给出所有的事件 $A \in \mathscr{F}$ 的概率 $\Pr(A)$. 如果 A 可以被写成 $\{X \in B\}$ 的形式，那么我们可以用 $\Pr(X \in B)$ 来刻画 $\Pr(A)$. 而我们之前说过，要确定 $\Pr(X \in B)$，至少要先确定 $\Pr(X \in (a, b))$. 这一概率还是有两个未定元 a, b，所以更简便的方式是确定 $F_X(b) = \Pr(X \in (-\infty, b])$，容易证明，开区间的概率完全可以由 $F_X(b)$ 给出，所以 F_X 完全刻画了 $\Pr$. 更一般地，我们有如下定义.

定义 C.7 (分布函数) 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$X : \Omega \to \mathbb{R}$ 是一个随机变量. 定义函数 $F_X : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 为 $F_X(x) = \Pr(X \leq x)$. 我们称 F_X 是 X 的**分布函数**，记作 $X \sim F_X$.

如果 $X : \Omega \to \mathbb{R}^n$ 是一个随机向量，定义函数 $F_X : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 为 $F_X(x) = \Pr(X \leq x)$，这里 $X \leq x$ 是指对任意的 $i = 1, 2, \ldots, n$，都有 $X_i \leq x_i$. 我们称 F_X 是 X 的**分布函数**，记作 $X \sim F_X$.

容易验证，分布函数具有如下的性质：

命题 C.4 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$X : \Omega \to \mathbb{R}$ 是一个随机变量，F_X 是它的分布函数，则

1. F_X 是一个非减函数；
2. $\lim_{x\to-\infty} F_X(x) = 0$，$\lim_{x\to+\infty} F_X(x) = 1$；
3. F_X 是右连续的，即对任意 $x \in \mathbb{R}$，都有 $\lim_{y\downarrow x} F_X(y) = F_X(x)$；
4. F_X 在每一点处的左极限存在，即对任意 $x \in \mathbb{R}$，都有 $F(x-) = \lim_{y\uparrow x} F_X(y)$ 存在.

实际上，分布函数也可以由命题C.4 的前三条性质给出定义，这是因为，满足前三条性质的函数恰好是某个随机变量的分布函数：

定理 C.4 设 F 是 $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 的函数，满足命题 C.4 的前三条性质.
在概率空间 $([0,1], \mathscr{B}([0,1]), \lambda)$ 上，存在一个随机变量 X，使得 $F_X = F$.

所以，我们今后也称呼满足命题C.4 四条性质的函数为分布函数.
我们看一个分布函数计算概率的简单例子.

例 C.8 考虑 $\mathbb{R}$ 上的分布函数 F，它由随机变量 X 定义. 那么，

- $\Pr(X \le a) = F(a)$,
- $\Pr(X < a) = F(a-)$,
- $\Pr(X > a) = 1 - F(a)$,
- $\Pr(X \ge a) = 1 - F(a-)$,
- $\Pr(X = a) = F(a) - F(a-)$. □

对于 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 型的分布函数 F，我们也有类似的讨论. 此时有多个维度，所以我们需要引入一个差分算子 $\Delta_{a_i b_i}$，它的作用是对第 i 维作差：

$$\begin{aligned}&\Delta_{a_i b_i} F(x_1, x_2, \ldots, x_n)\\ =&F(x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}, b_i, x_{i+1}, \ldots, x_n) - F(x_1, x_2, \ldots, x_{i-1}, a_i, x_{i+1}, \ldots, x_n).\end{aligned}$$

例如，对于区间 $(a, b] = \{(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n : a_i < x_i \le b_i\}$，我们有

$$\Pr(X \in (a, b]) = \Delta_{a_1 b_1} \Delta_{a_2 b_2} \cdots \Delta_{a_n b_n} F_X(x_1, x_2, \ldots, x_n).$$

容易证明，分布函数具有如下的性质：

命题 C.5 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是一个概率空间，$X : \Omega \to \mathbb{R}^n$ 是一个随机向量，F_X 是它的分布函数，则

1. 对任意 $a_i \le b_i$，$i = 1, 2, \ldots, n$，都有 $\Delta_{a_i b_i} F_X(x_1, x_2, \ldots, x_n) \ge 0$；
2. 所有 x_i 趋于正无穷时，F_X 趋于 1；任意一个 x_i 趋于负无穷时，F_X 趋于 0；
3. F_X 对所有的 x_i 都是右连续的，即当 $y \downarrow x$（即对所有分量都有 $y_i \downarrow x_i$）时，都有 $F_X(y) \to F_X(x)$.

同样，以上三条性质就决定了一个分布函数. 我们有如下的定理：

定理 C.5 设 F 是 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 的函数，满足命题 C.5 的三条性质.
在概率空间 $([0,1]^n, \mathscr{B}([0,1]^n), \lambda)$ 上，存在一个随机向量 X，使得 $F_X = F$.

因此，我们今后也称呼满足命题 C.5 三条性质的函数为分布函数.

> **注.** 定理 C.4 和定理 C.5 其实还发挥着另一个重要的作用. 随机变量和随机向量的定义是非常抽象的，所以我们并不能很直接验证随机变量的存在性. 然而，分布函数却是极其容易构造的. 所以利用分布函数的存在性我们可以确保随机变量的存在性.

如果我们就限制在空间 $([0,1]^n, \mathscr{B}([0,1]^n), \lambda)$ 上，随机向量几乎就等同于分布函数. 在更一般的情况下，两个随机向量 X, Y 的分布函数相同时，我们称 X, Y 同分布，记为 $X \overset{d}{=} Y$.

现在，我们将分布函数与概率测度联系在一起：

定理 C.6 设 $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是一个分布函数，则在可测空间 $(\mathbb{R}^n, \mathscr{B}(\mathbb{R}^n))$ 上，存在唯一的概率测度 $\Pr$，使得对任意 $a_i \le b_i$，

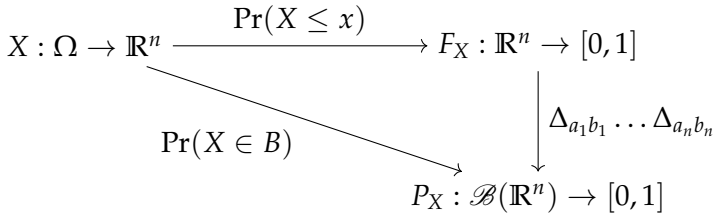
$$\Pr\left(\prod_{i=1}^{n}(a_i, b_i]\right) = \Delta_{a_1 b_1}\Delta_{a_2 b_2}\cdots\Delta_{a_n b_n} F(x_1, x_2, \ldots, x_n).$$

特别地，分布函数

$$F(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ x, & 0 \le x \le 1, \\ 1, & x > 1. \end{cases}$$

对应的概率测度就是我们之前讨论的 $[0,1]$ 上的 Lebesgue 测度.

总结来说，随机向量 X、概率测度 P_X 和分布函数 F_X 的关系如图：

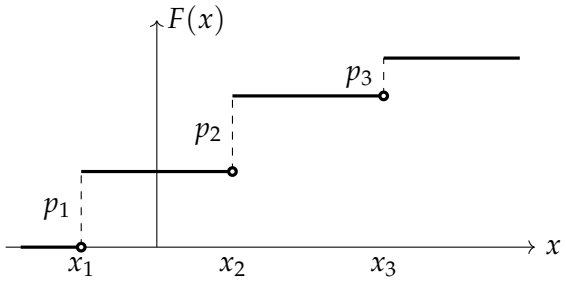


这张图的每一个箭头都可以反过来，但是反过来的这些关系都比较不直观，所以我们不再讨论.

根据上面的讨论，分布函数的特性决定了随机变量的特性. 根据分布函数的不同性质，我们可以将随机变量分为不同的类型. 下面我们将讨论一些重要的类别.

§C.2.2 离散型随机变量

我们首先讨论离散型随机变量. 离散型随机变量的分布函数 F 称之为离散型分布，它是一个阶梯函数，它的函数值只在有限或者可数个点 $x_1, x_2, \dots$ 上发生跳变，在 x_i 的跳变为 $p_i = F(x_i) - F(x_i-)$. 这一分布函数对应的概率测度 Pr 我们称之为离散型测度，这种测度集中在 x_i 上，即 $\Pr(X = x_i) = p_i$. 分布函数形如下图：



离散型分布可以由分布列给出，分布列是一个序列 $p_1, p_2, \dots$，其中 $p_i = \Pr(X = x_i)$，且 $\sum_{i=1}^{\infty} p_i = 1$.

表 C.1 列举了一些本书中用到的离散型分布，他们都是整数取值，所以我们记 $p_i = \Pr(X = i)$.

§C.2.3 连续型随机变量

我们再来讨论连续型随机变量，连续型随机变量的分布函数 F 称为连续型分布，对应的概率测度 Pr 称之为绝对连续测度. 从名字上就可以看出，测度才是定义连续型随机变量的关键. 我们给出绝对连续测度的定义.

名称	符号	分布列	参数
离散均匀	$\mathcal{U}[n]$	$p_i = 1/n,\ i = 1,\dots,n$	$n \in \mathbb{N}$
Bernoulli	$B(1,p)$	$p_1 = p,\ p_0 = 1-p$	$p \in [0,1]$
对称 Bernoulli	—	$p_1 = p_{-1} = 1/2$	—
二项	$B(n,p)$	$p_k = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$	$n \in \mathbb{N},\ p \in [0,1]$

表 C.1: 本书中用到的离散型分布

定义 C.8 (绝对连续测度) $\mathbb{R}$ 上的测度 Pr 称为**绝对连续测度**，如果对任意 $\epsilon > 0$，存在 $\delta > 0$ 使得任意 $A \in \mathscr{B}(\mathbb{R})$ 满足 $\lambda(A) < \delta$，都有 $\Pr(A) < \epsilon$.

直观上说，绝对连续测度的意思是当体积 $\lambda(\cdot)$ 发生微小变化的时候(变化量为 $\lambda(A)$)，测度 $\Pr(\cdot)$ 也只发生微小的变化（变化量为 $\Pr(A)$），这和通常函数连续的定义并没有太大的区别.

那么，绝对连续测度对应的是连续分布函数吗？并非如此！不过，绝对连续测度对应的分布函数有相当漂亮的一种刻画方式：

定理 C.7 (微积分基本定理) *设 $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是绝对连续测度对应的分布函数，那么*

$$\lambda(\{x \in \mathbb{R} : F'(x) \text{ 不存在}\}) = 0.$$

定义函数：

$$f(x) = \begin{cases} F'(x), & F'(x) \text{ 存在}, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$$

则 f 是一个非负可积函数，且对任意的 $a < b$，都有

$$F(b) - F(a) = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x. \tag{C.1}$$

此处的积分可以理解为 Riemann 积分或者后面附录 C.3 中的 Lebesgue 积分.

定理 C.7 意味着，绝对连续测度对应的分布函数几乎处处可以求导，并且所得到的导函数积分回去还是原来的分布函数，也就是微积分基本定理成立. 这样的函数我们称之为绝对连续函数.

那么，这个 f 应该如何理解呢？先不管定理 C.7，回到绝对连续测度，仿照导数的定义，考虑极限

$$\frac{\mathrm{d}\Pr}{\mathrm{d}\lambda}(x) = \lim_{\lambda(A)\to 0, x\in A} \frac{\Pr(A)}{\lambda(A)},$$

也就是点 x 附近 $\Pr(\cdot)$ 的微小变化相对于 $\lambda(\cdot)$ 的微小变化.

那么，给定一个集合 A，要如何求 $\Pr(A)$？按照微积分的朴素直观，我们应该将 $\Pr$ 微小的变化转变为 λ 微小的变化，也就是积分：

$$\Pr(A) = \int_{x\in A} \frac{\mathrm{d}\Pr}{\mathrm{d}\lambda}(x)\mathrm{d}\lambda(x).$$

我们可以把(C.1) 改写成如上的形式：

$$\Pr((a,b]) = \int_{x\in(a,b]} f(x)\mathrm{d}x.$$

在一维的情况下，x 的微小变化就是 $\lambda(x)$ 的微小变化，所以 $\mathrm{d}x = \mathrm{d}\lambda(x)$. 综合这两点，我们容易相信，

$$f(x) = \frac{\mathrm{d}\Pr}{\mathrm{d}\lambda}(x) \iff \mathrm{d}\Pr = f(x)\mathrm{d}\lambda.$$

所以，f 应该理解为“密度”. 打个比方，λ 是物体的体积，$\Pr$ 是物体的质量，那么 f 就是这个物体每个很小的部分上的体积质量除以体积，也就是密度. 所以，我们将 f 称之为**概率密度函数**，或者简称**密度**. 通常，X 的密度记作 p_X.

那么，概率测度和密度的区别是什么呢？对于刚接触概率论的人来说，似乎很难理解他们之间的区别. 比如说，有时候会写 $p(X = x)$ 甚至 $\Pr(X = x)$ 来表示密度在 x 处的值 $p(x)$，又或者，用 $\int \Pr(X = x)\mathrm{d}x$ 来表示对密度的积分. 这些当然都是不对的，我们下面慢慢论述.

首先，根据定理 C.7，F 是连续函数，所以根据例 C.8，$\Pr(X = x) = F(x) - F(x-) = F(x) - F(x) = 0$. 所以 $\Pr(X = x)$ 根本就是零，它和密度函数没有任何关系，所以上面这些写法都是错的.

那么，要怎么理解密度 $p(\cdot)$ 和概率测度 $\Pr(\cdot)$ 的区别呢？当然，从定义的角度他们就完全不同：一个是从实数到实数的映射，一个是从实数的集合到实数的映射. 但是这样的区别对于初学者来说并不直观. 最直观的区别就在于密度这一词：虽然铅很重（密度大），但是几亿倍于铅体积的棉花却应该比铅重. 所以，密度是微观的，刻画很小部分集合的概率值，也就是 $\mathrm{d}\Pr = p_X\mathrm{d}\lambda$；而概率刻画的是宏观的，计算任何一个集合的概率，也就是 $\Pr(X \in A)$.

> **注.** 上面的记号 $\mathrm{d}\Pr/\mathrm{d}\lambda$ 并不是随意写出来的，我们叫它导数也不是随意的. 在测度论中，定理 C.7 可以被推广为 **Radon-Nikodym 定理**，这一定理直接保证了形如 $\mathrm{d}\Pr/\mathrm{d}\lambda$ 的函数的存在性，这一函数被称之为 **Radon-Nikodym 导数**.

利用密度，我们可以很容易计算概率：

定理 C.8 设 X 是一个连续型随机变量，f 是它的密度函数，则对任意的 $B \in \mathscr{B}(\mathbb{R})$，都有

$$\Pr(X \in B) = \int_{x \in B} f(x)\mathrm{d}x.$$

在表 C.2 中，我们给出本书中用到的一些连续型分布的密度函数.

名称	符号	密度函数	参数
连续均匀	$\mathcal{U}(a,b)$	$p(x)=\frac{1}{b-a},\ x\in[a,b]$	$a<b$
指数	$\mathsf{Exp}(\lambda)$	$p(x)=\lambda \mathrm{e}^{-\lambda x},\ x\geq 0$	$\lambda>0$
双指数	$\mathsf{DExp}(\lambda)$	$p(x)=\frac{\lambda}{2}\mathrm{e}^{-\lambda\lvert x\rvert},\ x\in\mathbb{R}$	$\lambda>0$
Laplace	$\mathsf{Lap}(\mu,\lambda)$	$p(x)=\frac{\lambda}{2}\mathrm{e}^{-\lambda\lvert x-\mu\rvert},\ x\in\mathbb{R}$	$\mu\in\mathbb{R},\ \lambda>0$
正态（Gauss）	$\mathcal{N}(\mu,\sigma^2)$	$p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\mathrm{e}^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}},\ x\in\mathbb{R}$	$\mu\in\mathbb{R},\ \sigma>0$

表 C.2: 本书中用到的连续型分布

注. 从定理 C.7 来看，密度函数的定义似乎是唯一的，但是从积分的角度，如果密度函数在几个点上的值发生了变化，并不影响整个积分的值，从而也不影响求概率. 比如均匀分布 $\mathcal{U}(a,b)$，端点 a,b 的值到底是 0 还是 $1/(b-a)$ 并不重要，取任何一个值都是可以的.

注. 密度函数通常是需要分段写出的，比如，$U(a,b)$ 的密度函数，严格来说应该写为

$$p(x)=\begin{cases}0, & x<a,\\ \frac{1}{b-a}, & x\in[a,b],\\ 0, & x>b.\end{cases}$$

为了简化记号，我们可以用**示性函数**来表示这一分类. 设 $A\subseteq\mathbb{R}$，定义函数

$$I_A(x)=\begin{cases}1, & x\in A,\\ 0, & x\notin A.\end{cases}$$

则 $U(a,b)$ 的密度函数可以写为

$$p(x)=\frac{1}{b-a}I_{[a,b]}(x).$$

更一般地，示性函数中的字母 A 可以是任意一个事件，而关于事件的那些记号都可以在 A 这里写出. 示性函数在概率论中有着核心的作用，我们在后面将会经常用到示性函数.

§C.2.4 随机向量，条件分布，独立性

我们前面已经说过，随机向量就是 $\Omega \to \mathbb{R}^n$ 的映射. n 维的随机向量可以看成 n 个随机变量的组合，可以写作 $X = (X_1, \ldots, X_n)^\mathsf{T}$. 通常，我们将 X 的分布函数称为 $X_1, \ldots, X_n$ 的*联合分布*，将 X_i 的分布函数称为 X 的*边缘分布*.

关于随机变量的分类可以完全平行移植到随机向量上. 下面我们分别讨论.

离散型随机向量指的是它对应的概率测度集中在有限或可数个点上. 这样的分布依然可以用分布列给出：$\Pr(X_1 = x_1, \ldots, X_n = x_n) = p_{x_1,\ldots,x_n}$，其中 x_i 取遍所有可能的值.

本书中使用的离散型随机向量只有多项分布，符号为 $PN(n, p_1, \ldots, p_k)$，分布列为

$$\Pr(X_1 = i_1, \ldots, X_n = i_n) = \frac{n!}{i_1! \cdots i_k!} p_1^{i_1} \cdots p_k^{i_k},$$

其中 $n \in \mathbb{N}$，$p_i \geq 0$，$\sum_{i=1}^k p_i = 1$.

连续型随机向量指的是它对应的概率测度是绝对连续的. 连续型随机向量的分布函数依然由绝对连续函数刻画：

定理 C.9 *设 $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是绝对连续测度对应的分布函数，那么存在一个非负可积函数 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，使得对任意的 $(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$，都有*

$$F(x_1, \ldots, x_n) = \int_{-\infty}^{x_1} \cdots \int_{-\infty}^{x_n} f(y_1, \ldots, y_n) \mathrm{d}y_1 \cdots \mathrm{d}y_n.$$

此时，f 称为 X 的**概率密度函数**，或者简称**密度**. 通常，X 的密度记作 p_X.

类似随机变量的讨论，密度函数依然可以被写做导数的形式. 假设 Pr 是绝对连续测度，它对应的密度是 p，那么

$$\frac{\mathrm{d}\Pr}{\mathrm{d}\lambda}(x) = p(x) \iff \mathrm{d}\Pr = p(x)\mathrm{d}\lambda.$$

这里，我们需要再给出一些 $\mathrm{d}\lambda$ 和 $\mathrm{d}x$ 关系的讨论. $\mathrm{d}\lambda$ 应该理解为 Lebesgue 测度的微小变化，然而我们并不假定这一变化是如何产生的. $\mathrm{d}x$ 理解为 x 的微小变化. x 的微小变化自然就产生了 λ 的微小变化，即 $\lambda(\mathrm{d}x)$. 所以，在 x 处，$\mathrm{d}\lambda$ 和 $\mathrm{d}x$ 之间的关系应该是 $\mathrm{d}\lambda = \lambda(\mathrm{d}x)$，于是 $\mathrm{d}\lambda$ 应该理解为 $\mathrm{d}x$ 形成的长方体的体积.

同样，密度给出了概率计算的一个重要工具：

定理 C.10 *设 X 是一个 n 维连续型随机向量，f 是它的密度函数，则对任意的 $B \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$，都有*

$$\Pr(X \in B) = \int_{x \in B} f(x)\mathrm{d}x.$$

利用联合密度，可以计算边缘密度：

定理 C.11 设 $X=(X_1,\dots,X_n)$ 是一个 n 维连续型随机向量,, 则对任意的 $1\le i\le n$, 都有

$$p_{X_i}(x_i)=\int_{(x_1,\dots,x_{i-1},x_{i+1},\dots,x_n)\in\mathbb{R}^{n-1}} p_X(x_1,\dots,x_n)\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{i-1}\mathrm{d}x_{i+1}\cdots\mathrm{d}x_n.$$

这一命题当然也可以自然推广到求随机向量的边缘密度, 例如利用 $X=(X_1,X_2,X_3)$ 的联合密度计算 (X_1,X_2) 的边缘密度:

$$p_{X_1,X_2}(x_1,x_2)=\int_{x_3\in\mathbb{R}} p_X(x_1,x_2,x_3)\mathrm{d}x_3.$$

连续型随机变量的一个重要的例子是多元正态分布，或者（非退化）Gauss 向量. 它的密度函数为

$$p(x)=\frac{1}{(2\pi)^{n/2}\sqrt{\det\Sigma}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^{\mathsf{T}}\Sigma^{-1}(x-\mu)},$$

其中 $\mu\in\mathbb{R}^n$，Σ 是一个 $n\times n$ 的正定矩阵. 这一分布的符号是 $\mathcal{N}(\mu,\Sigma)$.

关于 Gauss 向量的性质，我们将在附录 C.4 中讨论.

接下来，我们讨论条件分布.

对于离散型随机向量 $X=(X_1,X_2)$，它的分布完全由分布列给出. 我们可以定义 X_1 在给定 X_2 的条件下的分布列:

$$\Pr(X_1=x_1|X_2=x_2)=\frac{\Pr(X_1=x_1,X_2=x_2)}{\Pr(X_2=x_2)}.$$

由此给出了随机变量 X_1 在给定 X_2 的条件下的条件分布列，继而给出了条件分布. 这一定义也可以推广到 X_i 是随机向量的情况.

然而，对于一般的随机向量，特别是连续型随机向量，这一定义是行不通的. 比如，如果 $X=(X_1,X_2)$ 是连续型随机向量，那么 $\Pr(X_2=x_2)=\Pr(X_1=x_1,X_2=x_2)=0$，所以条件概率的分子和分布概率都是零，这样的定义是没有意义的.

转换思路，去尝试定义所谓的条件分布函数: $\Pr(X_1\le x_1|X_2=x_2)$. 考虑 $\Pr(X_1\le x_1|x_2<X_2\le x_2+\epsilon)$，再令 $\epsilon\downarrow 0$，我们有如下计算:

$$\begin{aligned}
&\lim_{\epsilon\downarrow 0}\Pr(X_1\le x_1|x_2<X_2\le x_2+\epsilon)\\
=&\lim_{\epsilon\downarrow 0}\frac{\Pr(X_1\le x_1,X_2\le x_2+\epsilon)-\Pr(X_1\le x_1,X_2\le x_2)}{\Pr(x_2<X_2\le x_2+\epsilon)}\\
=&\lim_{\epsilon\downarrow 0}\frac{F_X(x_1,x_2+\epsilon)-F_X(x_1,x_2)}{F_{X_2}(x_2+\epsilon)-F_{X_2}(x_2)}.
\end{aligned}$$

如果上面的极限存在，我们就定义它是 X_1 在给定 X_2 的条件下的条件分布.

如果 X 是连续性随机变量，我们还可以继续算下去：

$$\begin{aligned}
&\lim_{\epsilon\downarrow 0}\frac{F_X(x_1,x_2+\epsilon)-F_X(x_1,x_2)}{F_{X_2}(x_2+\epsilon)-F_{X_2}(x_2)}\\
=&\frac{\partial F_X(x_1,x_2)}{\partial x_2}\frac{1}{p_{X_2}(x_2)}\\
=&\int_{-\infty}^{x_1}\frac{\partial^2 F_X(y,x_2)}{\partial x_2\partial y}\frac{1}{p_{X_2}(x_2)}\mathrm{d}y\\
=&\int_{-\infty}^{x_1}\frac{p_{X_1,X_2}(y,x_2)}{p_{X_2}(x_2)}\mathrm{d}y.
\end{aligned}$$

对照定理 C.7，我们知道 $p_{X_1,X_2}/p_{X_2}$ 具有密度函数的形式，所以连续性随机向量所定义的条件分布也是连续型分布，密度函数被 $p_{X_1,X_2}/p_{X_2}$ 通常记作 $p_{X_1|X_2}$，称为 X_1 在给定 X_2 的条件下的*条件密度*.

以上讨论也可以自然推广到 X_i 是随机向量的情况，我们就不给出了.

最后，我们讨论随机向量之间的独立性. 随机向量之间的独立性完全由事件的独立性刻画，所以我们有如下定义：

定义 C.9 (随机向量的独立性) 设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个随机向量，第 i 个的维数是 n_i. 如果对任意的 $1\le i_1,\dots,i_k\le n$，以及任意的 $B_{i_1}\in\mathscr{B}(\mathbb{R}^{n_{i_1}}),\dots,B_{i_k}\in\mathscr{B}(\mathbb{R}^{n_{i_k}})$，都有

$$\Pr(X_{i_1}\in B_{i_1},\dots,X_{i_k}\in B_{i_k})=\Pr(X_{i_1}\in B_{i_1})\cdots\Pr(X_{i_k}\in B_{i_k}),$$

则称 $X_1,\dots,X_n$ 是**独立的**.

特别地，如果 $X_1,\dots,X_n$ 是一维的，那么这定义了随机变量之间的独立性.

这一定义中包含了无穷多个需要验证的等式，利用分布函数，我们可以将独立性的验证转化为一个等式的验证：

定理 C.12 *设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个随机向量，第 i 个的维数是 n_i，F_i 是 X_i 的分布函数，F 是 $(X_1,\dots,X_n)$ 的联合分布函数. $X_1,\dots,X_n$ 独立的充分必要条件是*

$$F(x_1,\dots,x_n)=F_1(x_1)\cdots F_n(x_n),$$

其中 $x_i\in\mathbb{R}^{n_i}$.

对于离散型随机向量，它的分布函数完全由分布列决定，所以定理 C.12 等价于如下命题：

命题 C.6 设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个离散型随机向量，第 i 个的维数是 n_i，p_i 是 X_i 的分布列，p 是 $(X_1,\dots,X_n)$ 的联合分布列. $X_1,\dots,X_n$ 独立的充分必要条件是

$$p(x_1,\dots,x_n)=p_1(x_1)\cdots p_n(x_n),$$

其中 $x_i\in\mathbb{R}^{n_i}$.

对于连续型随机向量，它的分布函数完全由密度决定，所以定理 C.12 等价于如下命题：

命题 C.7 设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个连续型随机向量，第 i 个的维数是 n_i，p_i 是 X_i 的密度函数. 假设他们的联合分布具有密度函数 p. $X_1,\dots,X_n$ 独立的充分必要条件是

$$p(x_1,\dots,x_n)=p_1(x_1)\cdots p_n(x_n),$$

其中 $x_i\in\mathbb{R}^{n_i}$.

上面两个命题都有更简单的形式：

推论 C.2 设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个连续型（离散型）随机向量，第 i 个的维数是 n_i，假设他们的联合分布具有密度函数（分布列）p. $X_1,\dots,X_n$ 独立的充分必要条件存在函数 $f_1,\dots,f_n$ 使得

$$p(x_1,\dots,x_n)=f_1(x_1)\cdots f_n(x_n),$$

其中 $x_i\in\mathbb{R}^{n_i}$.

利用这一命题，判断独立性的时候，我们只要尝试将联合密度（分布列）分解成若干个函数的乘积即可.

对于连续型随机向量，这一判据特别要注意密度函数的分段情况. 比如，考虑 $X=(X_1,X_2)$，其密度函数为

$$p(x_1,x_2)=\begin{cases}8x_1x_2, & 0\le x_1\le x_2, 0\le x_2\le 1,\\ 0, & \text{其他.}\end{cases}$$

如果忽略了 x_i 的取值范围，我们很容易以为 $p(x_1,x_2)$ 可以写成 $f(x_1)f(x_2)$，所以他们独立. 然而事实并不是这样的！计算 X_1 的边缘密度：

$$p_1(x_1)=\int_{x_2\in\mathbb{R}}p(x_1,x_2)\mathrm{d}x_2=\begin{cases}4x_1(1-x_1^2), & 0\le x_1\le 1,\\ 0, & \text{其他.}\end{cases}$$

再计算 X_2 的边缘密度：

$$p_2(x_2) = \int_{x_1 \in \mathbb{R}} p(x_1, x_2) \mathrm{d}x_1 = \begin{cases} 4x_2^3, & 0 \leq x_2 \leq 1, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$$

显然，$p_1(x_1) \cdot p_2(x_2) \neq p(x_1, x_2)$，所以 X_1, X_2 不独立.

如果使用示性函数来书写密度函数，这一问题更不容易被忽视，在上面的例子中，$p(x_1, x_2) = 8x_1x_2I_{0 \leq x_1 \leq x_2 \leq 1}(x_1, x_2)$，示性函数显然是拆不成分别只关于 x_1 和 x_2 的函数乘积的.

自然，利用条件分布，我们可以给出独立的另一种刻画：

命题 C.8 设 X_1, X_2 是两个随机变量，他们的联合分布是离散型或连续型的. X_1, X_2 独立的充分必要条件是对任意的 x_1, x_2，都有

$$\Pr(X_1 \leq x_1 | X_2 = x_2) = \Pr(X_1 \leq x_1).$$

如果 X_1, X_2 是离散型的，那么这一条件可以改写为

$$\Pr(X_1 = x_1 | X_2 = x_2) = \Pr(X_1 = x_1).$$

如果 X_1, X_2 是连续型的，那么这一条件可以改写为

$$p_{X_1|X_2}(x_1|x_2) = p_{X_1}(x_1).$$

注意，上述判据并不需要真的把等式右边的量算出来，我们只需要判断刻画条件分布的量（条件分布函数、条件分布列或条件密度）中，是不是只出现了 x_1 而没有出现 x_2.

§C.2.5 随机变量（向量）的函数

我们前面说过，如果 X 是随机向量，g 是一个 Borel 函数，那么 $g(X) = g \circ X$ 也是一个随机向量. 这里，记号 $g \circ X$ 将 X 看成一个映射，于是得到的是一个复合函数；而记号 $g(X)$ 则更直观，它表示把 X 看成一个数学对象（随机向量），然后对它进行函数运算，得到另一个同类型的数学对象（随机向量）. 我们将始终采取后者的记号，但请务必注意，符号 $g(X)$ 中的 X 绝对不应该理解为一个数，而应该理解为一个随机向量.

随机变量的函数最直接的问题就是，它的分布是什么？我们只关注离散型和连续型随机向量的情况.

对于离散型随机向量，它的分布完全由分布列决定，很容易得到如下命题：

定理 C.13 设 X 是一个离散型随机向量，g 是一个函数，那么 $Y = g(X)$ 也是一个离散型随机向量，它的分布列为

$$\Pr(Y = y) = \sum_{x \in g^{-1}(y)} \Pr(X = x).$$

对于连续型随机向量，它的分布完全由密度决定. 我们现在来推导连续型随机向量的函数的密度.

设 X 是一个 n 维连续型随机向量，$g \in C^1(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$，即 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 的连续可微函数. 为了简便起见，我们假设 g 是单射，并且反函数也连续可微. 设 $Y = g(X)$，可以证明，Y 是一个连续型随机向量.

我们现在来计算 Y 的密度. 考虑 Y 取值的一个微小的区域 $\mathrm{d}y$，$\mathrm{d}P_Y = p_Y \lambda(\mathrm{d}y)$ 是 Y 在 $\mathrm{d}y$ 上的概率，同样区域的概率也可以用 X 去计算：

$$\mathrm{d}P_X = p_X \lambda(\mathrm{d}x), \quad Y \in \mathrm{d}y \iff X \in \mathrm{d}x,$$

当然，这里 $\mathrm{d}y$ 和 $\mathrm{d}x$ 由函数 g 联系在一起，因为 $Y = g(X)$，所以 $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x = g'(X)$，注意，这相当于微元 $\mathrm{d}y$ 和微元 $\mathrm{d}x$ 的有向体积的比. 最后，根据概率相等，可以写出如下的等式：

$$\mathrm{d}P_Y = \mathrm{d}P_X \iff p_Y \lambda(\mathrm{d}y) = p_X \lambda(\mathrm{d}x). \tag{C.2}$$

考虑到密度是计算体积而非有向体积，根据 Jacobi 行列式的几何意义（见附录 B.3.1），

$$p_Y(y) = \left|\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}y}\right| p_X(x) = \left|\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right|^{-1} p_X(x) = |\det g'(x)|^{-1} p_X(x).$$

这就得到了 Y 的密度函数.

如果 g 不是单射，那么上面的 (C.2) 需要考虑 g 每一个单射的局部. 例如，如果 $g(x) = x^2$，那么 g 在 $(0, +\infty)$ 上和 $(-\infty, 0)$ 上都是单射，一个 y 对应了两个 x. 在这种情况下，每一个 y 所对应的 x 都贡献了概率，所以 (C.2) 需要写成

$$\mathrm{d}P_Y = \sum_{g(x)=y} \mathrm{d}P_X(x) \iff p_Y \lambda(\mathrm{d}y) = \sum_{g(x)=y} p_X(x) \lambda(\mathrm{d}x)(x). \tag{C.3}$$

总结以上讨论，我们得到连续型随机向量的函数的密度的计算公式：

定理 C.14 设 X 是一个连续型随机向量，$g \in C(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$，即 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 的连续函数，假设 $\lambda(\{x \in \mathbb{R}^n : \det g'(x) \neq 0\}) = 0$，则 $Y = g(X)$ 也是一个连续型随机向量，它的密度函数为

$$p_Y(y) = \begin{cases} \sum_{g(x)=y} |\det g'(g^{-1}(y))|^{-1} p_X(g^{-1}(y)), & \det g'(g^{-1}(y)) \neq 0, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases}$$

其中求和号中 $g^{-1}(y)$ 是根据相应的 x，用反函数定理（定理B.18）求出局部反函数.

这一定理的表述比较宽泛，我们可以给一个具体的例子来理解.

例 C.9 设 X 是一个连续型随机变量，$g(x) = x^2$，我们来计算 $Y = X^2 = g(X)$ 的密度. 直接计算定理C.14 中的公式，我们有

$$\begin{aligned}&\sum_{g(x)=y} |\det g'(g^{-1}(y))|^{-1} p_X(g^{-1}(y))\\ =&\sum_{x^2=y} \frac{1}{2|x|} p_X(x)\\ =&\frac{1}{2\sqrt{y}} p_X(\sqrt{y}) + \frac{1}{2\sqrt{y}} p_X(-\sqrt{y}).\end{aligned}$$

这就给出了 Y 的密度. □

一般来说，定理C.14 中的公式并不好记，最实用的还是根据 X 和 Y 在算相同的概率这一事实直接写出 (C.3)，然后根据具体的 g 来计算. 比如上面的例子，我们可以直接写出

$$p_Y \lambda(\mathrm{d}y) = p_X(\sqrt{y})\lambda(\mathrm{d}x)(\sqrt{y}) + p_X(-\sqrt{y})\lambda(\mathrm{d}x)(-\sqrt{y}).$$

两边除以 $\lambda(\mathrm{d}y)$，再利用 $\mathrm{d}y/\mathrm{d}x = 1/(2x)$，就得到了 Y 的密度.

最后，如果映射 g 并不是保持维度的，例如 $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$，但 $m < n$[1]，那么我们可以将 g 补全到 n 维映射，也就是说，我们可以定义一个新的函数 $G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 满足

$$G(x_1, \ldots, x_n) = (g_1(x_1, \ldots, x_n), \ldots, g_m(x_1, \ldots, x_n), x_{m+1}, \ldots, x_n)^{\mathsf{T}}.$$

然后，利用这一函数计算出 $g(X)$ 和 $(X_{m+1}, \ldots, X_n)$ 的联合概率密度，再求出 $g(X)$ 的边缘密度.

我们看一个简单的例子.

例 C.10 (卷积) 设 X, Y 是随机变量，我们来计算 $Z = X + Y$ 的密度. 我们可以将 Z 看成是 $g(X, Y) = (X + Y, Y)$ 的第一个维度. 映射 $(x, y) \mapsto (x + y, y)$ 显然是双射，所以 (C.3) 退化为 (C.2)，我们有

$$p_{Z,Y}(z, y) = \left|\frac{\partial(z, y)}{\partial(x, y)}\right|^{-1} p_{X,Y}(x, y) = p_{X,Y}(z - y, y).$$

[1]如果 $m > n$，那么 $g(X)$ 一定不会是连续型随机变量，因为它的每个维之间一定会产生相互的关联，所以我们不讨论这种情况.

于是，Z 的边缘密度为

$$p_Z(z) = \int_{y\in\mathbb{R}} p_{X,Y}(z-y,y)\mathrm{d}y.$$

这被称为 X 和 Y 的**卷积**. □

最后，对随机向量作用函数是不会影响独立性的：

命题 C.9 *设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个随机向量，第 i 个的维数是 n_i，g_i 是 $\mathbb{R}^{n_i}\to\mathbb{R}^{m_i}$ 的 Borel 函数，$Y_i = g_i(X_i)$，如果 $X_1,\dots,X_n$ 相互独立，那么 $Y_1,\dots,Y_n$ 也相互独立.*

§C.3 随机变量的数字特征，条件数学期望

分布函数或者随机变量依然是一个映射，研究起来还是会比较复杂. 我们希望能够用一些数字来刻画随机变量的特征，这样可以进一步简化问题. 在这一节中，我们将介绍随机变量的数字特征，以及条件数学期望.

§C.3.1 数学期望，Lebesgue 积分

数学期望在数学上是很直观的，我们可以从一个赌博的例子入手来找一些感觉.

例 C.11 在一个地下赌场，有赌徒甲乙两人. 这是一个公平的赌局，每局甲乙获胜概率都是 $1/2$，每局各出赌注 50 块. 谁先赢到三局，就可以赢得全部的赌注. 赌博进行了三轮，甲赢了两局，乙赢了一局. 这时，突然有消息说警察马上就要来查封赌场，甲乙于是决定将目前的所有赌资进行分割. 他们应该如何分割呢?

再赌两盘就会决出胜负，赌博一共会有三种可能：

1. 第四盘甲赢，于是甲赢的所有赌注，这样的概率是 $1/2$;
2. 第四盘乙赢，第五盘甲赢，于是甲赢的所有赌注，这样的概率是 $(1/2)\times(1/2) = 1/4$;
3. 乙连赢两盘，于是乙赢的所有赌注，这样的概率是 $(1/2)\times(1/2) = 1/4$.

现在的赌资是 $100\times 3 = 600$ 块，甲有 $1/2+1/4 = 3/4$ 的概率会拿到全部，乙有 $1/4$ 的概率会拿到全部. 于是，按照概率去平分的话，甲应该拿走 450 块，乙应该拿走 150 块.□

这个例子说明了期望的一种理解方式：在面对随机性的时候，我们按照概率的权重分配. 比如，上面的例子中，设 X 是甲赢的赌注，那么 X 的分布列为 $\Pr(X=0) = 1/4$，$\Pr(X=600) = 3/4$，所以 $\mathbb{E}[X] = 0\times 1/4 + 600\times 3/4 = 450$.

以上的例子给了我们定义随机变量期望的基础：定义示性函数的数学期望. 设 A 是一个事件，那么 I_A 是一个随机变量：

$$I_A(\omega) = \begin{cases} 1, & \omega \in A, \\ 0, & \omega \notin A. \end{cases}$$

我们称之为事件 A 的示性函数. 示性函数的分布列是

$$\Pr(I_A = 1) = \Pr(A), \quad \Pr(I_A = 0) = \Pr(A^c) = 1 - \Pr(A).$$

所以，示性函数的数学期望，按照上面的逻辑，应该是

$$\mathbb{E}[I_A] = 1 \times \Pr(A) + 0 \times \Pr(A^c) = \Pr(A).$$

示性函数建立了概率和数学期望的联系. 下面，我们来定义一般随机变量的数学期望，这一定义的过程反映了一种数学的思想：用简单东西的极限去研究复杂的东西.

第一步，定义示性函数的数学期望[2]. $\mathbb{E}[I_A] = \Pr(A)$.

第二步，定义简单随机变量的数学期望. 简单随机变量是形如 $X = \sum_{k=1}^{n} x_k I_{A_k}$ 的随机变量，其中 $x_k \in \mathbb{R}$，A_k 是事件. 定义

$$\mathbb{E}[X] = \sum_{k=1}^{n} x_k \Pr(A_k).$$

这一定义与第一步是相容的：因为 $I_A = 1 \cdot I_A$，所以 $\mathbb{E}[I_A] = 1 \cdot \Pr(A) = \Pr(A)$.

第三步，定义非负随机变量的数学期望. 非负随机变量是指 $X(\omega) \geq 0$ 对任意 ω 成立的随机变量 X. 考虑一列简单随机变量 $\{X_n\}_{n=1}^{\infty}$，它满足对于每一个 $\omega \in \Omega$ 都有当 $n \to \infty$ 时 $X_n(\omega) \uparrow X(\omega)$. 容易验证，$\mathbb{E}[X_n]$ 也是单调递增的，所以根据命题 B.13，$\mathbb{E}[X_n]$ 有有限的极限或者趋于正无穷，我们都记为 $\lim_{n\to\infty} \mathbb{E}[X_n]$.

定义 C.10 (数学期望（Lebesgue 积分），非负情形) 称

$$\mathbb{E}[X] = \lim_{n\to\infty} \mathbb{E}[X_n]$$

为随机变量 X 的**数学期望**或 **Lebesgue 积分**.

可以证明，这一定义不依赖于 $\{X_n\}_{n=1}^{\infty}$ 的选取，因而是良定义的. 此外，容易看出，这一定义与第二步是相容的，所以第三步扩展了第二步的定义.

第四步，定义一般随机变量的数学期望. 考虑随机变量 X，定义 $X^+ = \max\{X, 0\}$，$X^- = -\min\{X, 0\}$，也就是 X 的正数部分和负数部分，那么 $X = X^+ - X^-$. 我们有如下定义：

[2]从逻辑上说，示性函数的数学期望是被定义出来的，而不是被算出来的，因为此时我们还完全没有定义什么是数学期望.

定义 C.11 (数学期望（Lebesgue 积分），一般情形) 称随机变量 X 的数学期望**存在**，如果 $\mathbb{E}[X^+]$ 和 $\mathbb{E}[X^-]$ 至少有一个有限. 此时，定义

$$\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}[X^+] - \mathbb{E}[X^-]$$

为随机变量 X 的**数学期望**或 **Lebesgue 积分**.

如果 $\mathbb{E}[X^+]$ 和 $\mathbb{E}[X^-]$ 都是有限的，那么称 X 有**有限期望**或**可积的**.

当我们强调积分的时候，$\mathbb{E}[X]$ 也会写为

$$E[X] = \int_\Omega X \mathrm{d}\Pr.$$

以上定义适用于任何一种概率空间和概率测度. 容易看出来，这一定义也适用于 $\mathbb{R}^n$ 上的 Lebesgue 测度，我们唯一需要改变的就是示性函数的 Lebesgue 积分的定义：对任意 $A \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$，定义

$$\int_{\mathbb{R}^n} I_A(\omega)\lambda(\mathrm{d}\omega) = \lambda(A).$$

然后对简单函数定义积分，再对非负函数定义积分，最后对一般函数定义积分.

对于 $\mathbb{R}^n$ 上的 Lebesgue 积分，我们一般省略 λ[3]，直接写成

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(x)\mathrm{d}x.$$

这与我们所熟知的积分符号就完全一致了.

上面定义随机变量期望的过程中，最难以理解的是第三步，也就是非负随机变量的数学期望. 我们来具体算一下它的表达式.

设 X 是一个非负随机变量，分布为 F. 我们来计算 $\mathbb{E}[X]$，与其说是计算，不如说重新推导一遍第三步的过程. 首先，我们将 X 取值范围离散化，每 $1/n$ 一段，X 的值都压到形如 k/n 的点上，这样就转化为了一个离散型随机变量：

$$X_n = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k}{n} I_{\{k/n \le X < (k+1)/n\}}.$$

容易看出，$X_n(\omega) \uparrow X(\omega)$ 对任意 ω 成立. 于是，我们有

$$\mathbb{E}[X] = \lim_{n\to\infty} \mathbb{E}[X_n].$$

[3]对于一维的情况，见附录 C.2.3 的讨论. 在高维空间中，这样的记号其实是相当糟糕的：在微分学中，求导数时，$\mathrm{d}x$ 被理解为切空间的向量，或者一个微小的位移；求然而在积分学中，$\mathrm{d}x$ 被理解为所对应平行体的体积. 所以其实 $\lambda(\mathrm{d}x)$ 这一记号虽然复杂，但是含义更准确.

我们来计算 $\mathbb{E}[X_n]$，注意到 X_n 是一个简单随机变量，我们有

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[X_n] &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k}{n} \Pr\left(\frac{k}{n} \le X < \frac{k+1}{n}\right) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k}{n} \left(F\left(\frac{k+1}{n}\right) - F\left(\frac{k}{n}\right)\right).\end{aligned}$$

按照极限的想法，当 $n \to \infty$ 时，上式的求和项相当于 $x\mathrm{d}F(x)$，这里 $\mathrm{d}F$ 表示 x 微小变化时对应的 F 的微小变化. 所以形式上我们有

$$\mathbb{E}[X] = \int_{x \ge 0} x\mathrm{d}F(x) = \int_{\mathbb{R}} x\mathrm{d}F(x),$$

这里第二个等式是因为在 $x < 0$ 的时候 F 恒等于 0，因而可以理解为 $\mathrm{d}F(x) = 0$.

如果 X 不是非负的，那么对 X^+ 和 X^- 分别计算数学期望，然后相减，就得到了一般随机变量的数学期望，它依然满足：

$$\mathbb{E}[X] = \int_{\mathbb{R}} x\mathrm{d}F(x).$$

所以，随机变量的数学期望完全取决于它的分布函数.

对于离散型随机变量来说，F 只在点 $x_1, x_2, \ldots$ 会发生改变，其他地方都是常值，所以我们有

$$\int_{\mathbb{R}} x\mathrm{d}F(x) = \sum_{k=1}^{\infty} x_k(F(x_k) - F(x_k-)) = \sum_{k=1}^{\infty} x_k \Pr(X = x_k).$$

对于连续型随机变量来说，$\mathrm{d}F = p\mathrm{d}x$，这里 p 是对应的密度. 于是我们有

$$\int_{\mathbb{R}} x\mathrm{d}F(x) = \int_{\mathbb{R}} xp(x)\mathrm{d}x.$$

以上就是概率论中常见的求期望的形式.

我们再介绍一个非常有用的符号，它允许我们在某个事件 A 上求积分：

$$\int_A X\mathrm{d}\Pr = \int_\Omega XI_A\mathrm{d}\Pr = \mathbb{E}[XI_A].$$

相应地，在 $\mathbb{R}^n$ 上，对我们也可以定义

$$\int_A f(x)\lambda(\mathrm{d}x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x)I_A(x)\lambda(\mathrm{d}x).$$

刻画随机变量的数字特征，除了可以用随机变量的期望，还可以用随机变量的函数的期望，我们列举一个重要的概念.

定义 C.12 (矩，方差，特征函数) 设 X 是一个随机变量，我们有如下定义：

- k 是一个正整数，称 $\mathbb{E}[X^k]$ 为 X 的 k **阶矩**；称 $\mathbb{E}[(X-\mathbb{E}[X])^k]$ 为 X 的 k **阶中心矩**；
- 称 $\mathbb{E}[(X-\mathbb{E}[X])^2]$ 为 X 的**方差**，记为 $\mathsf{Var}(X)$；
- 称 $f_X(t)=\mathbb{E}[\exp(itX)]$ 为 X 的**特征函数**. 一般地，如果 X 是 n 维随机向量，那么 $f_X:\mathbb{R}^n\to\mathbb{C}$，$f_X(t)=\mathbb{E}[\exp(i\langle t,X\rangle)]$ 被称为 X 的**特征函数**.

我们将会在后面讨论他们的性质.

§C.3.2 数学期望的性质

我们已经给出了数学期望的定义，下面我们罗列一些数学期望的性质，但都不给出证明.

命题 C.10 *1. 期望的线性性：设 X,Y 是随机变量，$a,b\in\mathbb{R}$，如果 $\mathbb{E}[X]$ 和 $\mathbb{E}[Y]$ 都存在，那么 $\mathbb{E}[aX+bY]$ 存在，且*

$$\mathbb{E}[aX+bY]=a\mathbb{E}[X]+b\mathbb{E}[Y].$$

2. 单调性：设 X,Y 是随机变量，如果 $X\le Y$，那么

$$\mathbb{E}[X]\le\mathbb{E}[Y].$$

3. 绝对值不等式：设 X 是随机变量，那么

$$\mathbb{E}[|X|]\ge|\mathbb{E}[X]|.$$

4. 局部可积性：设 X 是随机变量，并且 $\mathbb{E}[X]$ 存在，那么对任意事件 A，$\mathbb{E}[XI_A]$ 也存在；如果 $\mathbb{E}[X]$ 有限，那么 $\mathbb{E}[XI_A]$ 也有限.

接下来，我们讨论随机变量函数的期望的求法. 假设 X 是一个 n 维随机向量，$g:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ 是一个 Borel 函数，那么 $g(X)$ 也是一个随机变量（定理 C.3）. 计算 $\mathbb{E}[g(X)]$ 有以下两种方式，我们下面分别讨论.

第一种，利用附录 C.2.5 中的方法，我们可以将 $g(X)$ 的分布写出来，然后计算期望. 我们来看一个例子.

例 C.12 设 $X\sim\mathcal{U}(0,1)$，计算 $\mathbb{E}[X^2]$. 直接算出 $Y=X^2$ 的密度函数为

$$p_Y(y)=\begin{cases}\frac{1}{2\sqrt{y}}, & 0\le y\le 1,\\ 0, & \text{其他}.\end{cases}$$

于是，

$$\mathbb{E}[X^2] = \int_{\mathbb{R}} y p_Y(x) \mathrm{d}y = \int_0^1 \frac{y}{2\sqrt{y}} \mathrm{d}y = \frac{1}{3}.$$

□

第二种，我们从定义出发，直接计算 $\mathbb{E}[g(X)]$. 我们先考虑最简单的情况，即 g 连续并且 $0 \leq g \leq C$ 的情况，这里 C 是一个正常数. 我们还是试图使用第三步，用简单随机变量去逼近 $g(X)$. 我们选择离散化 X，还是一样定义

$$X_n = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k}{n} I_{\{k/n \leq X < (k+1)/n\}}.$$

可以证明[4]

$$\mathbb{E}[g(X)] = \lim_{n \to \infty} \mathbb{E}[g(X_n)].$$

用 X 的分布函数 F 写出来 $\mathbb{E}[X_n]$ 就是

$$\mathbb{E}[X_n] = \sum_{k=0}^{\infty} g\left(\frac{k}{n}\right) \left(F\left(\frac{k+1}{n}\right) - F\left(\frac{k}{n}\right)\right).$$

取极限，写成积分的形式，我们有：

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int_{\mathbb{R}} g(x) \mathrm{d}F(x).$$

利用逼近的思想，我们可以将上述结论推广到 g 是任意的 Borel 函数的情况，于是我们有：

定理 C.15 *设 X 是一个 n 维随机向量，每一维都可积，$g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是一个 Borel 函数，那么 $\mathbb{E}[g(X)]$ 存在，且*

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int_{\mathbb{R}^n} g(x) \mathrm{d}F_X(x).$$

特别地，如果 X 是一个离散型随机变量，取值为 $x_1, x_2, \ldots$，那么

$$\mathbb{E}[g(X)] = \sum_{k=1}^{\infty} g(x_k) \Pr(X = x_k).$$

如果 X 是一个连续型随机变量，密度为 p_X，那么

$$\mathbb{E}[g(X)] = \int_{\mathbb{R}^n} g(x) p_X(x) \mathrm{d}x.$$

[4]注意，这里 $g(X_n)$ 未必单调趋于 $g(X)$ 了，所以这里我们其实跳了一个比较重要的步骤，即不单调趋于的时候极限也可以拿到期望外面. 由于这一步的证明比较技术，而且对本书的讨论不是特别重要，所以这里略去.

例 C.13 我们重新算一次上面的例 C.12，这次我们用定理 C.15 来计算. 设 $X \sim \mathcal{U}(0,1)$，我们有

$$E[X^2] = \int_0^1 x^2 \mathrm{d}x = \frac{1}{3}.$$ □

从这两个例子就可以看出，以上两种方法，通常来说第二种会更加容易计算一些，因为它只需要做一次积分，而第一种方法还需要算变量替换的 Jacobi 行列式.

接下来，我们讨论示性函数的性质.

命题 C.11 *1. 设 A 是一个事件，那么 $\mathbb{E}[I_A] = \Pr(A)$，$\mathsf{Var}(I_A) = \Pr(A)(1-\Pr(A))$.*

2. 设 A, B 是两个事件，那么 $I_A I_B = I_{AB}$，特别地，$I_A^2 = I_A$.

这些性质的证明都比较容易，这里就不给出了.

利用示性函数，我们可以重写事件独立性的定义：

命题 C.12 *设 A, B 是两个事件，那么 A 和 B 独立的充分必要条件是*

$$\mathbb{E}[I_A I_B] = \mathbb{E}[I_A]\mathbb{E}[I_B].$$

如果我们还记得随机变量的期望是如何定义的，那么我们可以发现，命题 C.12 的结论可以推广到随机变量的情形：

定理 C.16 *设 X, Y 是两个相互独立的随机变量，那么 $\mathbb{E}[XY] = \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y]$.*

需要注意的是，这一命题的逆命题不一定成立.

最后，我们给一个重要的不等式. 我们说函数 $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是*凸函数*，如果对任意 $x, y \in \mathbb{R}$，$t \in [0,1]$，都有

$$g(tx + (1-t)y) \leq tg(x) + (1-t)g(y).$$

关于凸函数的更多讨论，见第 6.2 节. 我们有如下不等式：

定理 C.17 (Jensen 不等式) *设 X 是一个随机变量，$g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ 是一个凸函数，那么*

$$g(\mathbb{E}[X]) \leq \mathbb{E}[g(X)].$$

§C.3.3 随机变量的内积空间

我们指出，随机变量利用期望可以定义内积，从而定义内积空间，关于内积空间的讨论，见附录 A.5. 在附录 C.4 中，这一事实非常重要.

我们定义内积如下：

定义 C.13 (协方差) 设 X, Y 是两个随机变量，称

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

为 X 和 Y 的**协方差**.

容易验证，在差一个常数的意义下，协方差是一个对称正定的双线性型：

命题 C.13 $\mathsf{Cov}(\cdot, \cdot)$ *具有以下性质：*

1. *对称性：任意随机变量 X, Y，$\mathsf{Cov}(X, Y) = \mathsf{Cov}(Y, X)$；*
2. *单边线性性：任意随机变量 X, Y，$a, b \in \mathbb{R}$，$\mathsf{Cov}(aX + bY, Z) = a\mathsf{Cov}(X, Z) + b\mathsf{Cov}(Y, Z)$；*
3. *正定性：任意随机变量 X，$\mathsf{Cov}(X, X) \geq 0$，且 $\mathsf{Cov}(X, X) = 0$ 当且仅当存在常数 C 使得 $\Pr(X = C) = 1$.*

于是，在差一个常数的意义下，协方差是一个随机变量空间的内积. 按照内积空间的性质，随机变量的范数自然就是它的方差.

> **注.** 在命题 C.13 中，我们使用了 $\Pr(X = C) = 1$ 这样的表达. 在概率论中，如果一个事件是概率 1 发生的，我们称之为*几乎必然发生*. 在涉及与数学期望有关的性质的时候，我们通常只能在几乎必然的意义下成立，而不能在一般意义下成立. 比如说，“在差一个常数的意义下，协方差是一个随机变量空间的内积”这句话其实并不准确，严格来说，应该是“在差一个常数和几乎必然相等的意义下，协方差是一个随机变量空间的内积”. 也就是说，如果 $\|X\| = 0$，那么 X 几乎必然为常数.

协方差与独立性密切关联：

命题 C.14 *设 X, Y 是两个随机变量，如果 X 和 Y 相互独立，那么 $\mathsf{Cov}(X, Y) = 0$.*

我们称 $\mathsf{Cov}(X, Y) = 0$ 的两个随机变量是*不相关的*，用内积空间的术语，不相关的意思就是随机变量正交. 不相关的随机变量不一定是独立的，但是独立的随机变量一定是不相关的.

协方差的概念可以推广到多个随机变量上：

定义 C.14 (协方差矩阵) 设 $X_1, \dots, X_n$ 是 n 个随机变量，称他们的 Gram 矩阵为**协方差矩阵**，记为 Σ，其中

$$\Sigma_{ij} = \mathsf{Cov}(X_i, X_j).$$

如果 X 和 Y 分别是 m 维和 n 维随机向量，那么符号 $\mathsf{Cov}(X, Y)$ 表示的是 $m \times n$ 的矩阵 $(\mathsf{Cov}(X_i, X_j))_{ij}$，称为 X 和 Y 的**协方差矩阵.** 特别地，如果 $X = Y$，那么我们记 $\mathsf{Cov}(X, X)$ 为 $\mathsf{Var}(X)$，称为 X 的**协方差矩阵.**

根据 Gram 矩阵的性质（命题 A.8），X 的协方差矩阵是一个对称半正定矩阵.

类似地，我们也可以定义随机向量的数学期望：

定义 C.15 (随机向量的数学期望) 设 $X = (X_1, \dots, X_n)^\mathsf{T}$ 是一个 n 维随机向量，称

$$\mathbb{E}[X] = (\mathbb{E}[X_1], \dots, \mathbb{E}[X_n])^\mathsf{T}$$

为 X 的**数学期望.**

接下来，我们按照线性代数的思路，研究线性变换对于期望以及协方差矩阵的影响.

首先是期望，很容易证明如下的结论：

定理 C.18 *设 X 是一个 n 维随机向量，A 是一个 $m \times n$ 的矩阵，那么 $\mathbb{E}[AX] = A\mathbb{E}[X]$.*

接下来是协方差矩阵. 利用 Gram 矩阵与二次型的关系，我们容易写出如下的结论：

定理 C.19 *设 X 是一个 n 维随机向量，A 是一个 $m \times n$ 的矩阵，那么*

$$\mathsf{Var}(AX) = A\mathsf{Var}(X)A^\mathsf{T}.$$

证明. 考虑向量 t，和 n 维随机向量 Y，$t^\mathsf{T}Y$ 是一个随机变量，我们可以得到一个二次型

$$g(t) = \mathsf{Var}(t^\mathsf{T}Y) = \mathsf{Cov}(t^\mathsf{T}Y, t^\mathsf{T}Y) = t^\mathsf{T}\mathsf{Var}(Y)t.$$

当 $Y = AX$ 时，我们有

$$g(t) = \mathsf{Var}(t^\mathsf{T}AX) = \mathsf{Var}((A^\mathsf{T}t)X) = t^\mathsf{T}A\mathsf{Var}(X)A^\mathsf{T}t.$$

所以，对任意 t 都有 $t^\mathsf{T}\mathsf{Var}(AX)t = t^\mathsf{T}A\mathsf{Var}(X)A^\mathsf{T}t$，所以 $\mathsf{Var}(AX) = A\mathsf{Var}(X)A^\mathsf{T}$. □

上面的计算可以有一个线性代数的理解. 假如说 $X_1, \dots, X_n$ 是线性无关的，那么 $t^\mathsf{T}X$ 可以理解为某个向量在 $X_1, \dots, X_n$ 下的基表示，于是 t 是坐标. 而 $t^\mathsf{T}AX = (A^\mathsf{T}t)X$，因此 A^T 应该理解为某个线性映射 F 在 $X_1, \dots, X_n$ 下的矩阵. Gram 矩阵是二次型 $f(x) = \|x\|^2$ 在 $X_1, \dots, X_n$ 下的矩阵，因此在 F 的作用下，二次型的矩阵表示会做一个相应的合同变换，即 $A\mathsf{Var}(X)A^\mathsf{T}$.

§C.3.4 特征函数

在这一部分，我们讲述随机变量的特征函数，它是分布的另一种刻画方式.
显然，特征函数由分布函数决定. 反过来，特征函数也可以唯一决定分布！

定理 C.20 具有相同特征函数的随机变量（向量）具有相同的分布函数.

特征函数其实可以求出随机变量的分布函数：

定理 C.21 (逆转公式) 设 X 是随机变量，它的特征函数为 f_X，分布函数为 F_X，那么

1. 对于 F 的任意两个连续点 $a < b$，

$$F_X(b) - F_X(a) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-T}^{T} \frac{\mathrm{e}^{-ita} - \mathrm{e}^{-itb}}{it} f_X(t)\mathrm{d}t.$$

2. 如果 $\int_{\mathbb{R}} |f_X(t)|\mathrm{d}t < +\infty$，那么 X 具有密度 p_X，且

$$p_X(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{e}^{-itx} f_X(t)\mathrm{d}t.$$

这一公式也有随机向量的版本：

定理 C.22 (逆转公式，随机向量版本) 设 X 是 n 维随机向量，它的特征函数为 f_X，分布函数为 F_X，那么

1. 对于 F 的两个点 $a < b$，满足

$$\Pr(X_1 = c_1, \ldots, X_{k-1} = c_{k-1}, X_k \in (a_k, b_k], X_{k+1} = c_{k+1}, \ldots, X_n = c_n) = 0,$$

其中 $c_i \in \{a_i, b_i\}$，我们有

$$\begin{aligned} &F_X(b) - F_X(a) \\ =& \lim_{T_1,\ldots,T_n\to\infty} \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{-T_1}^{T_1} \cdots \int_{-T_n}^{T_n} \prod_{k=1}^{n} \frac{\exp(-it_k a_k) - \exp(-it_k b_k)}{it_k} f_X(t)\mathrm{d}t. \end{aligned}$$

2. 如果 $\int_{\mathbb{R}^n} |f_X(t)|\mathrm{d}t < +\infty$，那么 X 具有密度 p_X，且

$$p_X(x) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{e}^{-it^{\mathsf{T}}x} f_X(t)\mathrm{d}t.$$

特征函数特别适合处理独立随机变量的和：

定理 C.23 设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个相互独立的随机变量，它们的特征函数分别为 $f_1,\dots,f_n$，那么 $X_1+\cdots+X_n$ 的特征函数为 $f_1\dots f_n$.

比起卷积，用特征函数来算独立随机变量的和，方便得多.

特征函数也可以用来判定随机变量的独立性：

定理 C.24 设 $X_1,\dots,X_n$ 是 n 个随机变量，它们的特征函数分别为 $f_1,\dots,f_n$，随机向量 $X=(X_1,\dots,X_n)^\mathsf{T}$，它的特征函数为 f，那么 $X_1,\dots,X_n$ 相互独立的充分必要条件是

$$f(t_1,\dots,t_n)=f_1(t_1)\cdots f_n(t_n).$$

特征函数的导数可以用来计算随机变量的矩：

定理 C.25 设 X 是一个随机变量，它的特征函数为 f_X，那么对任意正整数 k，

$$\mathbb{E}[X^k]=\frac{f_X^{(k)}(0)}{i^k}.$$

总结起来，我们之前可以用分布列和密度函数来计算或者判定随机变量的各种性质和特征，现在都可以用特征函数来处理了.

§C.3.5 条件数学期望

数学期望的定义，从本质上说，就是对所有的取值做加权平均. 但是，有时候我们并不需要对所有的取值做加权平均，而只需要对某些取值做加权平均. 这时候，我们就需要引入条件数学期望的概念. 我们从一个直观的例子出发.

例 C.14 一个罐子里有 4 个红球，2 个灰球，4 个白球. 红球，灰球和白球的分数分别是 $4,2,1$. 现在随机抽一个球，抽球人戴着黑白滤镜的眼镜观察球的颜色，他不能分辨红球和灰球，但是可以区分这两种球和白球. 那么，在他观察过这个球之后，期望上得到的分数是多少?

和条件概率有类似的情况，此时并不完全是纯随机的，因为抽球人可以区分一些东西. 于是，样本空间可以分成两个部分，一个是 $A_1=\{r,g\}$，即抽到的球是红球或灰球；另一个是 $A_2=\{w\}$，即抽到的球是白球. 在第一种情况下，期望上的分数是

$$4\cdot\Pr(\{s\}|A_1)+2\cdot\Pr(\{g\}|A_1)=3.$$

在第二种情况下，期望上的分数是

$$1\cdot\Pr(\{w\}|A_2)=1.$$

□

更一般地，考虑样本空间 Ω，事件 $A_1, \ldots, A_n$，它们两两互斥，且 $\bigcup_{i=1}^n A_i = \Omega$，这形成了 Ω 的一个分割，记为 $\mathscr{A}$. 我们再假设 $\Pr(A_i) > 0$，我们有如下定义：

定义 C.16 (基于分割的条件数学期望) 设 X 是一个随机变量，$\mathscr{A} = \{A_1, \ldots, A_n\}$ 是 Ω 的一个分割，满足 $\Pr(A) > 0$ 对任意 $A \in \mathscr{A}$ 成立. X 在 $\mathscr{A}$ 上的**条件数学期望**是一个随机变量，记为 $\mathbb{E}[X|\mathscr{A}]$，它的定义为

$$\mathbb{E}[X|\mathscr{A}](\omega) = \sum_{i=1}^n \frac{\mathbb{E}[XI_{A_i}]}{\Pr(A_i)} I_{A_i}(\omega).$$

这个定义就是在说，当 ω 落在分割的某个集合 A_i 上时，我们按照 A_i 上的条件概率算期望. 记号 $\frac{\mathbb{E}[XI_{A_i}]}{\Pr(A_i)}$ 也记为 $\mathbb{E}[X|A_i]$，它的含义可以从 $X = I_B$ 来理解：

$$\frac{\mathbb{E}[I_B I_{A_i}]}{\Pr(A_i)} = \frac{\Pr(A_i B)}{\Pr(A_i)} = \Pr(B|A_i).$$

这一计算对示性函数解释了“按照 A_i 上的条件概率算期望”. 按照随机变量数学期望的定义，这一理解可以推广到一般随机变量.

条件数学期望是一个随机变量，意思就是我们能够消除某些不确定性. 在求数学期望的时候，我们完全不知道样本 ω 落在哪里，所以只能对整个 Ω 有一个预期. 在求对分割的条件数学期望的时候，我们能够知道 ω 落在了某个 A_i 中，因此我们的不确定性只在于 A_i 上，所以我们可以只对 A_i 中的 ω 有一个预期.

下面我们推广这一定义. 注意到，分割 $\mathscr{A}$ 其实生成了一个 Ω 的 σ-代数，即 $\sigma(\mathscr{A})$，它是包含 $A_1, \ldots, A_n$ 的最小 σ-代数. 容易验证，这一 σ-代数里的集合都是若干个 A_i 的并形成的. 分割里的事件代表了我们可以感知到的最小事件，而 σ-代数里的事件代表了我们可以感知到的事件的集合.

取 $A \in \sigma(\mathscr{A})$，要如何计算 X 在 A 上的期望呢？我们有两种方式，第一种，直接计算：$\mathbb{E}[XI_A]$. 第二种，我们将 A 写成 $A = \bigcup_{i=1}^k A_{n_i}$. 在每个 A_i 上，我们知道期望是 $\mathbb{E}[XI_A|A_i]$. 而落到 A_i 上的概率是 $\Pr(A_i)$，于是，按照数学期望加权平均的直觉，X 在 A 上的期望应该是

$$\sum_{i=1}^k \mathbb{E}[XI_A|A_i] \Pr(A_i).$$

这正好就是随机变量 $\mathbb{E}[XI_A|\mathscr{A}]$ 的数学期望 $\mathbb{E}[\mathbb{E}[XI_A|\mathscr{A}]]$.

对任意 $A \in \sigma(\mathscr{A})$，这两种计算方式都应该相等：

$$\mathbb{E}[XI_A] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[XI_A|\mathscr{A}]]. \tag{C.4}$$

这给了我们一般情况下的条件数学期望的定义：

定义 C.17 (基于 σ-代数的条件数学期望) 设 X 是一个非负随机变量，$\mathscr{G}$ 是 Ω 的一个 σ-代数，随机变量 $\mathbb{E}[X|\mathscr{G}]$ 被称为 X 关于 $\mathscr{G}$ 的**条件数学期望**，如果它满足

1. 对任意 $B \in \mathscr{B}(\mathbb{R})$，$\{\mathbb{E}[X|\mathscr{G}] \in B\}$ 是 $\mathscr{G}$-可测的；

2. 对任意 $A \in \mathscr{G}$，$\mathbb{E}[XI_A] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[X|\mathscr{G}]I_A]$.

设 X 是一个一般的随机变量，如果

$$\min\{\mathbb{E}[X^+|\mathscr{G}], \mathbb{E}[X^-|\mathscr{G}]\} < +\infty,$$

那么 X 关于 $\mathscr{G}$ 的**条件数学期望**是一个随机变量，记为 $\mathbb{E}[X|\mathscr{G}]$，定义为

$$\mathbb{E}[X|\mathscr{G}] = \mathbb{E}[X^+|\mathscr{G}] - \mathbb{E}[X^-|\mathscr{G}].$$

这一定义分成两部分，这类似于我们在定义数学期望时候做的事情：先定义非负的情况，再定义一般情况. 对于非负随机变量的定义，第一条要求是说，“$\mathbb{E}[X|\mathscr{G}]$ 落在合理的值集上”这件事情是可以用 $\mathscr{G}$ 中事件描述的，这和随机变量的定义是类似的；而第二条则反映了“条件”的性质，也就是我们刚刚讨论的 (C.4) 式.

定义中的 $\mathscr{G}$ 可以理解为我们观测样本的能力. $\mathscr{G}$ 越大，则越能确定 ω 具体的范围，所以条件期望就越像 $X(\omega)$；$\mathscr{G}$ 越小，则越不能确定 ω 具体的范围，所以条件期望就越像 $\mathbb{E}[X]$.

注意，基于 σ-代数的条件数学期望和基于分割的条件数学期望是一致的，所以这一定义是合理的.

最后，随机向量也是可以诱导条件数学期望的：

定义 C.18 (随机向量诱导的 σ-代数) 设 X 是一个 n 维随机向量，那么 X **诱导的** σ-**代数**是 Ω 的一个 σ-代数，记为 $\sigma(X)$，它的元素为 $\{X \in B\}$，其中 $B \in \mathscr{B}(\mathbb{R}^n)$.

我们说过，$\{X \in B\}$ 表示“X 落在合理的值集上”. 在之前定义随机变量的时候，我们要求取合理的值集是一个事件，这里则是更加简单粗暴，我们直接定义 $\{X \in B\}$ 是一个事件. 接下来，我们可以定义随机向量诱导的条件数学期望：

定义 C.19 (随机向量诱导的条件数学期望) 设 X 是一个随机变量，Y 是一个随机向量，那么 X 关于 Y 的**条件数学期望**是一个随机变量，记为 $\mathbb{E}[X|Y]$，定义为 $\mathbb{E}[X|\sigma(Y)]$.

我们之前定义过条件分布 $\Pr(X \leq x|Y = y)$，利用这一分布，我们可以求出一个条件数学期望 $\mathbb{E}[X|Y = y]$. 下面的命题表明，这一定义和定义 C.19 是相容的：

命题 C.15 设 X 是一个随机变量，Y 是一个 n 维随机向量，那么存在一个 *Borel* 函数 $g: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$，使得对任意 $\omega \in \Omega$，有

$$\mathbb{E}[X|Y](\omega) = g(Y(\omega))$$

并且

$$\mathbb{E}[X|Y = y] = g(y).$$

我们不满足于 $\mathbb{E}[X|Y = y]$，而是费尽周章定义条件期望 $\mathbb{E}[X|Y]$，是因为他通常来说更好用，特别是在随机过程中，它能给出很多公式直观上的含义. 这一点在第二章 中会有很多体现.

接下来我们讨论条件数学期望的性质，我们依然只列举而不证明.

命题 C.16 设 $(\Omega, \mathscr{F}, \Pr)$ 是概率空间，$\mathscr{G} \subseteq \mathscr{F}$ 是 Ω 的一个 σ-代数，那么

1. 期望的线性性：设 X, Y 是随机变量，$a, b \in \mathbb{R}$，如果 $\mathbb{E}[X|\mathscr{G}]$ 和 $\mathbb{E}[Y|\mathscr{G}]$ 都存在，那么 $\mathbb{E}[aX + bY|\mathscr{F}]$ 存在，且

$$\mathbb{E}[aX + bY|\mathscr{G}] = a\mathbb{E}[X|\mathscr{G}] + b\mathbb{E}[Y|\mathscr{G}].$$

2. 单调性：设 X, Y 是随机变量，如果 $X \leq Y$，那么

$$\mathbb{E}[X|\mathscr{G}] \leq \mathbb{E}[Y|\mathscr{G}].$$

3. 绝对值不等式：设 X 是随机变量，那么

$$\mathbb{E}[|X||\mathscr{G}] \geq |\mathbb{E}[X]|\mathscr{G}|.$$

4. 如果 $\mathscr{G} = \{\varnothing, \Omega\}$，那么

$$\mathbb{E}[X|\mathscr{G}] = \mathbb{E}[X].$$

5. 望远性：设 X 是随机变量，如果 $\mathscr{G}_1, \mathscr{G}_2 \subseteq \mathscr{F}$ 都是 Ω 的 σ-代数，且 $\mathscr{G}_1 \subseteq \mathscr{G}_2$，那么

$$\mathbb{E}[\mathbb{E}[X|\mathscr{G}_2]|\mathscr{G}_1] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[X|\mathscr{G}_1]|\mathscr{G}_2] = \mathbb{E}[X|\mathscr{G}_1].$$

6. 重期望公式：设 X 是随机变量，那么

$$\mathbb{E}[\mathbb{E}[X|\mathscr{G}]] = \mathbb{E}[X].$$

7. 设 X, Y 是随机变量，如果 $\sigma(Y) \subseteq \mathscr{G}$，那么

$$E[XY|\mathscr{G}] = Y\mathbb{E}[X|\mathscr{G}].$$

我们主要需要解释的是望远性. 可以把 σ-代数理解成观测的能力，这一代数越大，观测的越细致. 望远性的意思就是，如果我们用两次观测能力强弱不同的 σ-代数观测 X，那么最终的结果只取决于最粗糙的那个 σ-代数.

另外，重期望公式本质上就是期望版本的全概率公式（定理 C.1）. 从基于分割的条件数学期望的角度来看，这件事会更明显. 假设我们有一个分割 $\mathscr{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$，并且 $\Pr(A_i) > 0$，那么

$$\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[X|\mathscr{A}]] = \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}[X|A_i] \Pr(A_i).$$

最后，性质 7 是在说，如果 Y 是 $\mathscr{G}$-可测的（也就是我们用 $\mathscr{G}$ 可以完全确定 Y），那么求条件期望的时候 Y 就相当于一个常数，可以提到期望的外面.

§C.4 多元正态分布（Gauss 向量）

在这一节中，我们利用附录 C.3.3 和附录 C.3.4 中的工具，来研究多元正态分布.

多元正态分布的定义在附录 C.2.4 中已经给出，首先，我们不加证明地给出它的特征函数：

定理 C.26 设 $\mu \in \mathbb{R}^n$，Σ 是一个 $n \times n$ 的对称正定矩阵，那么随机向量 $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$ 的特征函数为

$$f_X(t) = \exp\left(it^\mathsf{T}\mu - \frac{1}{2}t^\mathsf{T}\Sigma t\right).$$

利用 (4.4)，我们可以计算出多元正态分布的期望和协方差矩阵：

命题 C.17 设 $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$，那么

$$\mathbb{E}[X] = \mu, \quad \mathsf{Var}(X) = \Sigma.$$

现在我们将这一定义推广. 注意到，Σ 就是 X 的协方差矩阵，所以定理 C.26 中的 Σ 并不要求正定，只要半正定就可以定义一个特征函数了. 我们将这一定义推广到半正定矩阵的情形：

定义 C.20 (Gauss 向量) 设 $\mu \in \mathbb{R}^n$，Σ 是一个 $n \times n$ 的对称半正定矩阵，如果随机向量 X 的特征函数为

$$f_X(t) = \exp\left(it^{\mathsf{T}}\mu - \frac{1}{2}t^{\mathsf{T}}\Sigma t\right),$$

那么称 X 是一个 **Gauss 向量**，记为 $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$.

如果 Σ 退化，X 不能写出密度，所以也不是连续型随机向量. 但是，利用特征函数，我们依然可以研究 X 的性质. 特别是命题 C.17，对于 Gauss 向量仍然成立.

Gauss 向量可以完全由它的期望和协方差矩阵刻画. 首先，Gauss 向量的独立性等价于不相关性：

定理 C.27 *设 $X = (X_1, \ldots, X_n) \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$，那么 $X_1, \ldots, X_n$ 相互独立的充分必要条件是 $X_1, \ldots, X_n$ 两两不相关，即 Σ 是一个对角矩阵.*

需要注意的是，如果 X 是正态分布，Y 是正态分布，这并不意味着 (X, Y) 是 Gauss 向量，因而并不能用不相关来作为独立性的判据. 因此，在一般情况下，我们必须要验证 $(X_1, \ldots, X_n)$ 是 Gauss 向量，然后才能断言不相关等价于独立.

当然，这一判据可以推广到多个 Gauss 向量的情形：

推论 C.3 *设 $X_1, \ldots, X_n$ 是 n 个 Gauss 向量，它们相互独立的充分必要条件是 $X_1, \ldots, X_n$ 两两不相关，即协方差矩阵 $\mathrm{Cov}(X_i, X_j) = O$，$i \neq j$.*

其次，利用定理 C.18 和定理 C.19，我们可以得到如下的结论：

定理 C.28 *设 $X \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$，$A$ 是一个 $m \times n$ 的矩阵，那么 $AX \sim \mathcal{N}(A\mu, A\Sigma A^{\mathsf{T}})$.*

取特定的 A，我们可以得到一个实用的推论：Gauss 向量的子向量仍然是 Gauss 向量，也就是说，取 $X = (X_1, \ldots, X_n)^{\mathsf{T}} \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma)$，那么对任意的 $1 \leq k \leq n$，$i_1, \ldots, i_k \in \{1, \ldots, n\}$，$(X_{i_1}, \ldots, X_{i_k})^{\mathsf{T}}$ 也是 Gauss 向量.

参考文献

[Bre57] Leo Breiman. The Individual Ergodic Theorem of Information Theory. *The Annals of Mathematical Statistics*, 28(3):809–811, 1957.

[CT12] Thomas M. Cover and Joy A. Thomas. *Elements of Information Theory*. John Wiley & Sons, 2012.

[Huf52] David A. Huffman. A Method for the Construction of Minimum-Redundancy Codes. *Proceedings of the IRE*, 40(9):1098–1101, September 1952.

[Inf] Information | Etymology, origin and meaning of information by etymonline. https://www.etymonline.com/word/information.

[Jay02] Edwin T. Jaynes. *Probability Theory: The Logic of Science*. Cambridge University Press, 2002.

[KL51] S. Kullback and R. A. Leibler. On Information and Sufficiency. *The Annals of Mathematical Statistics*, 22(1):79–86, 1951.

[LLG+19] Mike Lewis, Yinhan Liu, Naman Goyal, Marjan Ghazvininejad, Abdelrahman Mohamed, Omer Levy, Ves Stoyanov, and Luke Zettlemoyer. BART: Denoising Sequence-to-Sequence Pre-training for Natural Language Generation, Translation, and Comprehension, October 2019.

[McM53] Brockway McMillan. The Basic Theorems of Information Theory. *The Annals of Mathematical Statistics*, 24(2):196–219, June 1953.

[RHW86] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, and R. J. Williams. Learning internal representations by error propagation. In *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition, Vol. 1: Foundations*, pages 318–362. MIT Press, Cambridge, MA, USA, January 1986.

[Rob49] Robert M. Fano. *The Transmission of Information*. March 1949.

[Sha48] C. E. Shannon. A mathematical theory of communication. *The Bell System Technical Journal*, 27(3):379–423, July 1948.

[Shi96] A. N. Shiryaev. *Probability*, volume 95 of *Graduate Texts in Mathematics*. Springer, New York, NY, 1996.

[Tin62] Hu Kuo Ting. On the Amount of Information. *Theory of Probability & Its Applications*, 7(4):439–447, January 1962.

[Uff22] Jos Uffink. Boltzmann's Work in Statistical Physics. In Edward N. Zalta, editor, *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*. Metaphysics Research Lab, Stanford University, summer 2022 edition, 2022.

[李 10] 李贤平. 概率论基础. 高等教育出版社, 2010.

索引