人工智能的数学基础

一、函数

一次函数:

一个自变量的情形:

$$y = ax + b$$

多个自变量的情形:

$$y = ax_1 + bx_2 + c(a\text{、}b\text{、}c\text{是常数})$$

神经网络中的一次函数:

神经网络中，神经单元的加权输入可以表示为一次函数关系。例如，神经单元有三个来自下层的输入，其加权输入 z 的式子如下所示:

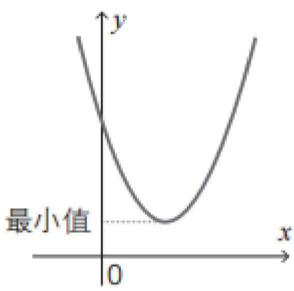
$$z = w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 + b$$

- 如果把作为参数的权重 w_1, w_2, w_3 与偏置 b 看作常数，那么加权输入 z 和x_1, x_2, x_3是一次函数关系。
- 另外，在神经单元的输入 x_1, x_2, x_3 作为数据值确定了的情况下，加权输入z 和权重 w_1, w_2, w_3以及偏置b是一次函数关系。
- 用误差反向传播法推导计算式时，这些一次函数关系使得计算可以简单地进行。

二次函数:

机器学习和深度学习中的代价函数使用了二次函数。

二次函数由下式表示: $y = ax^2 + bx + c$

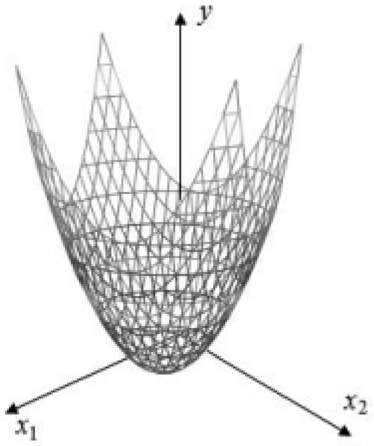


这个图像中重要的一点是，a 为正数时图像向下凸，从而存在最小值。

下凸的函数有最小值，这个性质是机器学习中最小二乘法（损失函数的平方误差总和）的基础

多个自变量的二次函数:

$y = ax_1^2 + bx_1x_2 + cx_2^2 + px_1 + qx_2 + r$

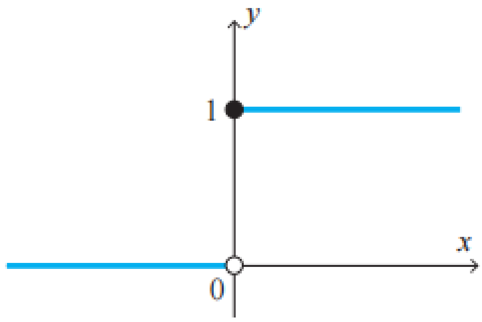


神经网络中要处理的二次函数

单位阶跃函数：

神经网络的原型模型是用单位阶跃函数作为激活函数

$f(x) = \begin{cases} 0, & (\mathrm{x}< \ 0) \\ 1, & (\mathrm{x} \geq 0) \end{cases}$ 此函数在原点不可导，所以不能作为主要的激活函数



单位阶跃函数的图像。在应用数学的世界里，这个函数活跃于线性响应理论之中。

指数函数与Sigmoid函数：

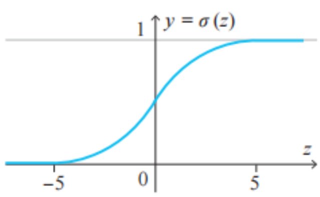
指数函数： $y = a^x, (a > 0, \mathrm{a} \neq 1)$

重要的底：自然数，欧拉数，纳皮尔数 $e = 2.71828\cdots$

Sigmoid函数：

$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$　　$\sigma(x)$是神经网络中，代表性的激活函数

这个函数的图像如右图所示。可以看出，这个函数是光滑的，也就是处处可导。函数的取值在 0 和 1 之间，因此函数值可以用概率来解释。



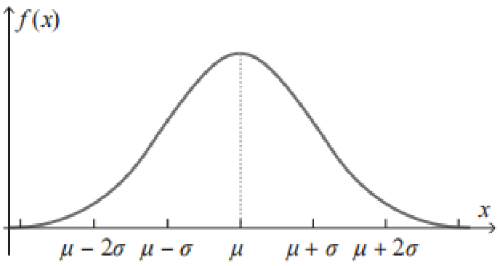
Sigmoid 函数的图像。

正态分布的概率密度函数

用计算机实际确定神经网络时，必须设定权重和偏置的初始值。求初始值时，正态分布（normal distribution）是一个有用的工具。使用服从这个分布的随机数，容易取得好的结果。

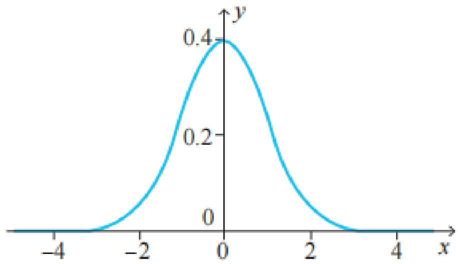
正态分布是服从以下概率密度函数 $f(x)$ 的概率分布

$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$　其中σ是标准差，μ 是期望值（平均值）



期望值为 μ，标准差为 σ 的正态分布。另外，这个 σ 与 Sigmoid 函数名 σ 的含义不同。

如下图所示，这个正态分布称为**标准正态分布**。



$\mu=0$，$\sigma=1$ 的正态分布概率密度函数的图像。

在 Excel 中，可以像下面这样产生正态分布随机数。

$=NORM.INV(RAND(),\mu,\sigma)$　　（μ、σ是期望值和标准差）

fx　=NORM.INV(RAND(), 0, 1)

C	D	E
x	NORM.INV(RAND(), 0, 1)	
	0.964881905	
	-0.056296049	
	-0.254253574	
	4.504953077	
	0.361585144	
	-1.048617802	
	0.580574108	
	1.022993279	
	-1.418756714	
	-2.127893513	
	-0.337876291	

方差或者说标准差越大，离散程度越大

参考阅读：https://blog.csdn.net/zhaodedong/article/details/103775963 （关于期望值和平均值）

参考阅读：https://blog.csdn.net/u013066730/article/details/83029619 （方差和标准差）

关于期望值和均值

关于方差和标准差

二、数列

理解了数列的递推公式，就很容易理解：求解预估值的正向传播（链式求值）、误差的反向传播（链式求导）

注意：计算机更擅长用递推公式进行运算，联想下程序设计中的递归

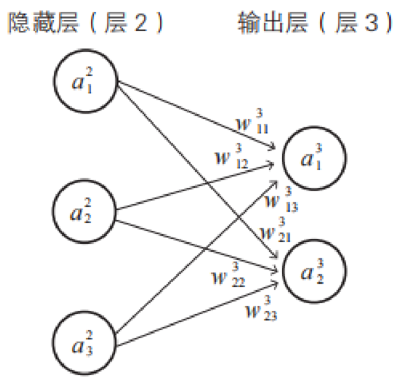
数列的通项公式和递推公式

- 等差数列通项公式：$a_n = a_1 + (n-1)d$
- 等比数列通项公式：$a_n = a_1 q^{n-1}$
- 等差数列递推公式：$a_{n+1} = a_n + d$
- 等比数列递推公式：$a_{n+1} = a_n q$
- 神经网络中，每一个神经单元可以理解为数列中的某一项

联立的递推公式

$$\begin{cases} a_{n+1} = a_n + 2b_n + 2 \\ b_{n+1} = 2a_n + 3b_n + 3 \end{cases}$$

如上，两个数列的联立递推公式，尝试理解如下神经网络中每个神经单元的值的计算



注：其中，a_n^m, b_n^m ：第m层第n个神经单元的值和偏置（激活神经单元的阈值）；

注：其中，w_i^j ： 第j层每个结点接收上层对应结点的数据的权重

$$\begin{cases} a_1^3 = \alpha(w_{11}^3 a_1^2 + w_{12}^3 a_2^2 + w_{13}^3 a_3^2 + b_1^3) \\ a_2^3 = \alpha(w_{21}^3 a_1^2 + w_{22}^3 a_2^2 + w_{23}^3 a_3^2 + b_2^3) \end{cases}$$

根据这个递推公式，第 3 层的输出 a_1^3和a_2^3由第 2 层的输出 a_1^2、 a_2^2 、a_3^2决定。

也就是说，第 2 层的输出与第 3 层的输出由联立递推公式联系起来。

三、∑符号的理解和使用

∑是一个需要下功夫来熟悉的符号。如果不理解∑，在阅读神经网络相关的文献时就比较麻烦。

这是因为将加权输入用∑符号来表示会简洁得多。

常见的希腊字母：

\sigma	Σ大写　σ小写
\alpha	A大写　α小写
\beta	B大写　β小写
\gamma	Γ大写　γ小写
\delta	Δ大写　δ小写
\epsilon	E大写　ϵ小写
\zeta	Z大写　ζ小写
\eta	H大写　η小写
\theta	Θ大写　θ小写
\lambda	Λ大写　λ小写

∑符号含义：表示数列的总和

$\sum_{i=1}^{n} a_i = a_1 + a_2 + \cdots + a_n$

∑符号性质：和的∑为∑的和，常数倍的∑为∑的常数倍

$\sum_{i=1}^{n}(a_i + b_i) = \sum_{i=1}^{n} a_i + \sum_{i=1}^{n} b_i$

$\sum_{i=1}^{n} ca_i = c\sum_{i=1}^{n} a_i$

在机器学习和深度学习的文献中，把加权输入用∑符号不是非常简洁。

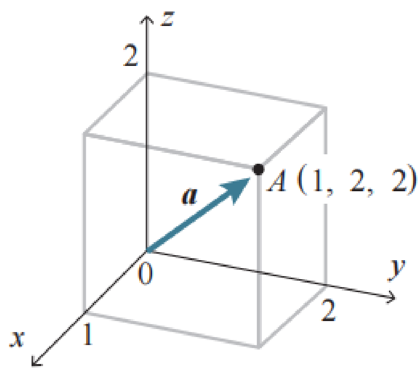
四、向量(Vector)

定义：

- 有向线段的属性：起点 *A* 的位置、指向 *B* 的方向，以及*AB* 的长度，也就是大小
- 把方向与大小抽象出来，这样的量叫作**向量**
- 向量是具有方向与大小的量，用箭头表示。
- 有向线段 *AB* 所代表的向量用 $\overrightarrow{AB}$ 表示，也可以用带箭头的单个字母$\vec{a}$表示。

向量的坐标表示法

- 把向量的箭头放在坐标系中，就可以用坐标的形式表示向量。
- 把箭头的起点放在原点，用箭头终点的坐标表示向量。
- 用坐标表示的向量 $\vec{a}$，$\vec{a} = (a_1, a_2)$
- 三维空间同理：$\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ ，$\vec{a} = (1, 2, 2)$，如图



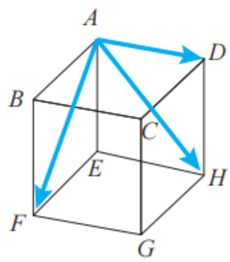
向量的大小：｜a｜

表示向量的箭头的**长度**称为这个向量的大小。向量 $\vec{a}$ 的大小用｜**a**｜表示。

向量的内积：$\vec{a}\cdot\vec{b}=|\vec{a}|\left|\vec{b}\right|\cos(\theta)$

在边长为 3 的立方体 $ABCD-EFGH$ 中，有

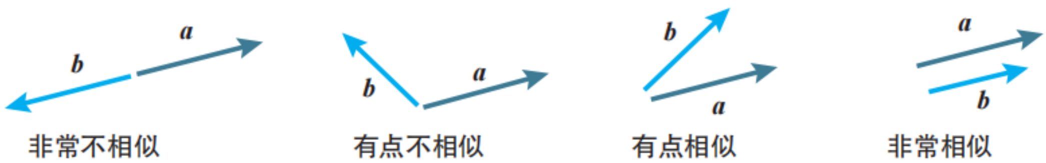
$$\overrightarrow{AD}\cdot\overrightarrow{AD}=|\overrightarrow{AD}||\overrightarrow{AD}|\cos 0°=3\cdot 3\cdot 1=9$$
$$\overrightarrow{AD}\cdot\overrightarrow{AF}=|\overrightarrow{AD}||\overrightarrow{AF}|\cos 90°=3\cdot 3\sqrt{2}\cdot 0=0$$
$$\overrightarrow{AF}\cdot\overrightarrow{AH}=|\overrightarrow{AF}||\overrightarrow{AH}|\cos 60°=3\sqrt{2}\cdot 3\sqrt{2}\cdot\frac{1}{2}=9$$



柯西 - 施瓦茨不等式：$-|a|\,|b|\leq a\cdot b\leq |a|\,|b|$

根据柯西 - 施瓦茨不等式，可以得出以下事实。

- 当两个向量方向相反时，内积取得最小值。**梯度下降法的基本原理**
- 当两个向量不平行时，内积取平行时的中间值。**越大越相似，考察卷积神经网络**
- 当两个向量方向相同时，内积取得最大值



通过内积可以知道两个向量的相对的相似度。

内积的坐标表示

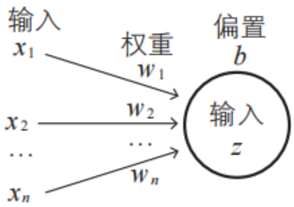
当$\vec{a}=(a1,a2)$，$\vec{b}=(b1,b2)$时，

$$\vec{a}\cdot\vec{b}=a_1b_1+a_2b_2$$

同理，三维空间情况下：当$\vec{a}=(a1,a2,a3)$，$\vec{b}=(b1,b2,b3)$时，

$$\vec{a}\cdot\vec{b}=a_1b_1+a_2b_2+a_3b_3$$

向量的一般化

- 向量的方便之处在于，二维以及三维空间中的性质可以照搬到任意维空间中；
- 神经网络虽然要处理数万维的空间，但是二维以及三维空间的向量性质可以直接利用。基于此，向量被充分应用在梯度下降法中；
- 二维以及三维空间中的向量公式推广到任意的 *n* 维空间：
  - 向量的坐标表示法：$\vec{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$
  - 内积的坐标表示：$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n$
- 在神经网络中使用内积形式：
  - 

  - 如图有两个向量：$\vec{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 和 $\vec{w} = (w_1, w_2, \cdots, w_n)$
  - 加权输入可表示为向量内积形式：$z = \vec{x} \cdot \vec{w} + b$

五、矩阵(Matrix)

什么是矩阵

- 矩阵就是数的阵列，如下：横排为行，竖排为列，构成一个3行3列的矩阵
- 行数和列数相同，称为**方阵**；
- (1,2,3)、(4,5,6)、(7,8,9)，称为**行向量**；(1,4,7)、(2,5,8)、(3,6,9)称为**列向量**；
- 行向量、列向量，也统称**向量**

$$\begin{Bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{Bmatrix}$$

- 扩展为一般形式：m行n列的矩阵

$$\begin{Bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{Bmatrix} \qquad (\text{m,n的矩阵})$$

- 位于第 i 行第 j 列的值（称为元素），用a_{ij}表示
- 很有名的矩阵（**单位矩阵**）：对角线的元素(a_{ii})为1，其他元素为0的**方阵**，用**E**表示

$$E = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Bmatrix} \quad (\text{注：E 为德语中表示 1 的单词 Ein 的首字母})$$

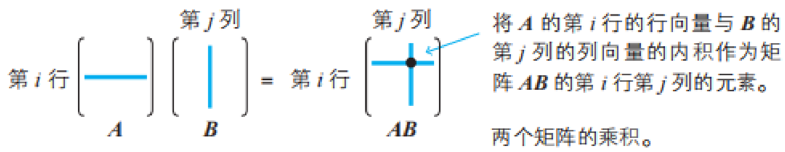
矩阵相等

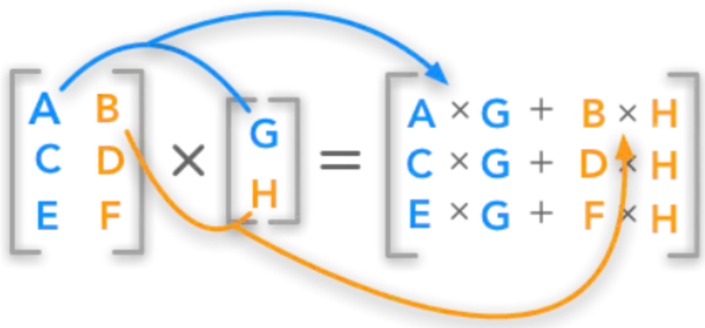
两个矩阵 **A**、**B** 相等的含义是它们对应的元素相等，记为 **A** = **B**

矩阵的和、差、常数倍

两个矩阵 **A**、**B** 的和 **A** + **B**、差 **A** - **B** 定义为相同位置的元素的和、差所产生的矩阵。此外，矩阵的常数倍定义为各个元素的常数倍所产生的矩阵。

矩阵的乘积

- 矩阵的乘积在神经网络的应用中特别重要。对于两个矩阵 **A**、**B**，将**A** 的第 *i* 行看作行向量，**B** 的第 *j* 列看作列向量，将它们的**内积**作为第 *i*行第 *j* 列元素，由此而产生的矩阵就是矩阵 **A**、**B** 的乘积 $A \cdot B$。
- 

- 矩阵的乘法不满足交换律。也就是说，除了例外情况，以下关系式成立：$A \cdot B \neq B \cdot A$
- 不是任何两个矩阵都能够相乘，**只有乘数矩阵A的列数和被乘矩阵B的行数相同的时候，两个矩阵才能相乘。**
- 维度为（m x n）的矩阵 A 和维度为（n x p）的矩阵 B 相乘，最终得到维度为（m x p）的矩阵 C。
- 

Hadamard 乘积

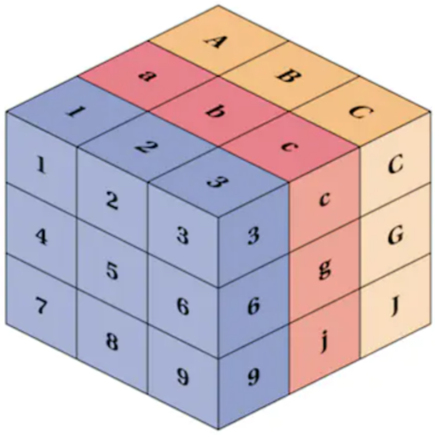
对于相同形状的矩阵 **A**、**B**，将相同位置的元素相乘，由此产生的矩阵称为矩阵 **A**、**B** 的 **Hadamard** 乘积，用 **A**⊙**B** 表示。

转置矩阵

- 将矩阵 **A** 的第 *i* 行第 *j* 列的元素与第 *j* 行第 *i* 列的元素交换，由此产生的矩阵称为矩阵 **A** 的转置矩阵（Transposed Matrix），用 t^A 或 A^T 等表示。
- 可以理解为把行向量转换成列向量（反之亦然，把列向量转换成行向量）

标量（Scalar)和张量（Tensor）理解

- 在机器学习和深度学习中，核心的数据结构就是标量、向量、矩阵和张量；
- 其中标量是单个数字，或者说，若 x∈ℝ 表示 x 是一个标量。
- 其中张量是更泛化的实体，是对标量，向量和矩阵的更高层封装，可以理解为，张量的特例是矩阵，矩阵的特例是向量，向量的特例是标量；
- 如下图：多个矩阵，或者说6个矩阵组成的一个张量



TENSOR

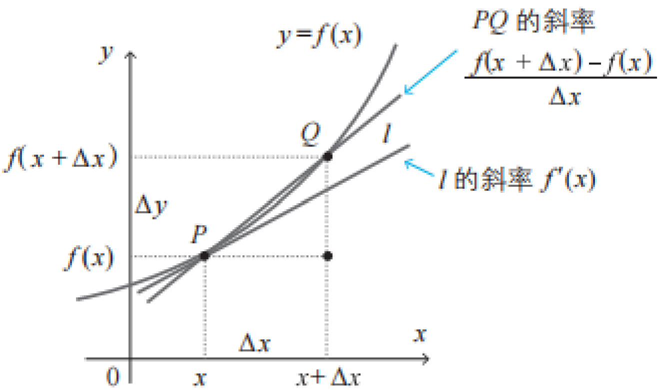
谷歌提供的人工智能学习系统（TensorFlow)的命名中使用了这个属于，据说来源于物理学中的"tension"(张力)，好比一个物体不同的截面上产生的应力方向和大小都不相同，张量是应力在数学上的抽象。

六、导数（derivatives）

导数的定义

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

导函数的含义如下图所示。作出函数 $f(x)$ 的图像，$f'(x)$ 表示图像切线的斜率。因此，具有光滑图像的函数是可导的。



导函数的含义。$f'(x)$ 表示图像切线的斜率。实际上，如果 Q 无限接近 P（也就是$\Delta x \to 0$），那么直线 PQ 无限接近切线 l。

神经网络中用到的函数的导数公式

我们很少使用上面的定义式来求导函数，而是使用导数公式。

下面我们就来看一下在神经网络的计算中使用的函数的导数公式（x 为变量、c 为常数）。

$$(c)' = 0 \qquad (e)' = 0 \qquad\qquad (\text{常数的导数为}0)$$
$$(x)' = 1$$
$$(x^2)' = 2x$$
$$(e^x)' = e^x$$
$$(e^{-x})' = -e^{-x}$$

导数符号

函数 $y = f(x)$ 的导函数用 $f'(x)$ 表示，但也存在不同的表示方法，比如可以用分数形式来表示：
$f'(x) = \frac{dy}{dx}$

这个表示方法是十分方便的，这是因为复杂的函数可以像分数一样计算导数

导数的性质

线性性：和的导数为导数的和，常数倍的导数为导数的常数倍。

$$[f(x) + g(x)]' = f'(x) + g'(x)$$
$$[cf(x)]' = cf'(x)$$

导数的线性性是误差反向传播法背后的主角（损失函数loss的反向传播）

分数函数的导数和 Sigmoid 函数的导数

当函数是分数形式时，求导时可以使用下面的分数函数的求导公式：

$$[\frac{1}{f(x)}]' = -\frac{f(x)}{[f(x)]^2}$$

Sigmoid 函数 $\sigma(x)$ 是神经网络中最有名的激活函数之一：$\sigma(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$

将 $1 + e^{-x}$ 代入上式：

$$\sigma'(x) = -\frac{(1+e^{-x})'}{(1+e^{-x})^2} = \frac{e^{-x}}{(1+e^{-x})^2} = \frac{1+e^{-x}-1}{(1+e^{-x})^2} = \frac{1}{1+e^{-x}} - \frac{1}{(1+e^{-x})^2} = \sigma(x) - \sigma(x)^2$$

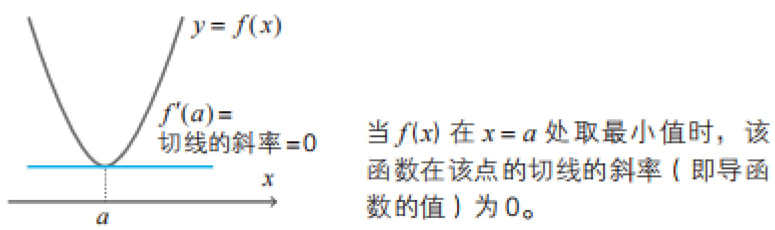
提取$\sigma(x)$，得到： $\sigma'(x) = \sigma(x)(1-\sigma(x))$

梯度下降法中，需要对这个Sigmoid函数求导。求导时使用上式会十分方便。

划重点：Sigmoid函数求导：$\sigma'(x) = \sigma(x)(1-\sigma(x))$

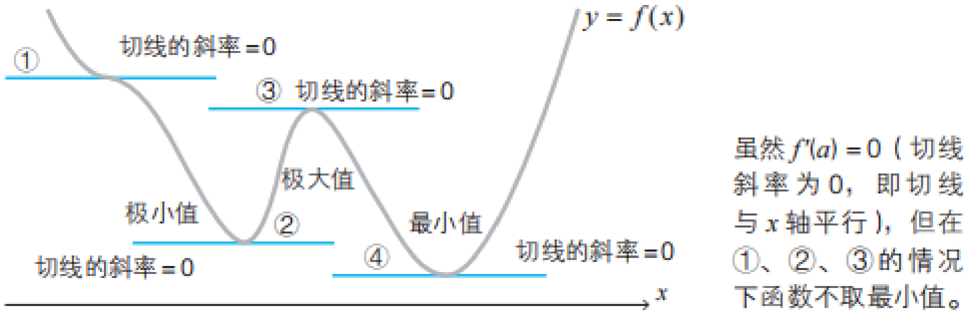
最小值的条件

由于导函数 $f'(x)$ 表示切线斜率，我们可以得到以下原理：**当函数$f(x)$在$x = a$处取得最小值时，$f'(a) = 0$。**



或者换句话说：**$f'(a) = 0$ 是函数 $f(x)$ 在$x = a$ 处取得最小值的必要条件**

但是，看看如下例子：



此函数，虽然是连续光滑的，但有不止一处增减性的变化，所以，**f'(a) = 0 是函数 *f* (*x*) 在*x* = *a* 处取得最小值的必要条件，仅仅是必要条件**

总结：需要连续光滑的**可导函数**，还要求是**凸函数**

七、神经网络的偏导数基础

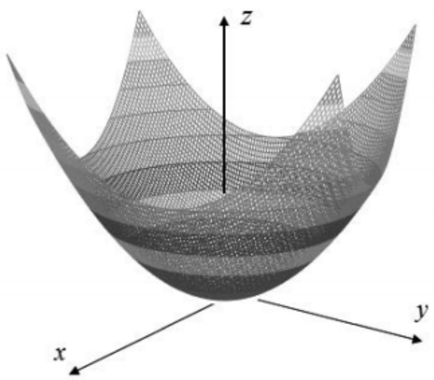
神经网络的计算往往会涉及成千上万个变量，这是因为构成神经网络的神经单元的权重和偏置都被作为变量处理。现在讨论下神经网络计算中所需的**多变量函数**的导数

多变量函数

有两个以上的自变量的函数称为多变量函数。如：

$$z = x^2 + y^2 \qquad (\text{x和y都是自变量})$$

$$\text{也可写成：} f(x,y) = x^2 + y^2$$



$z = x^2 + y^2$ 的图像。

再如：函数$f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$：是有 *n* 个自变量$x_1, x_2, \cdots, x_n$的函数

偏导数（partial derivative）

求导的方法也同样适用于多变量函数的情况。但是，由于有多个变量，所以必须指明对哪一个变量进行求导。在这个意义上，关于某个特定变量的导数就称为偏导数

对$f(x,y) = x^2 + y^2$ 这个多自变量函数，求偏导：

只看变量 x， 将 y 看作常数来求导：$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}$

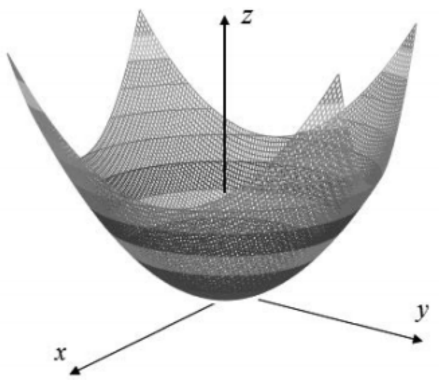
只看变量 y， 将 x 看作常数来求导：$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}$

当 $z=f(w,x,b)=wx+b$ 时，分别求偏导，得到：$\frac{\partial z}{\partial x}=w \qquad \frac{\partial z}{\partial w}=x \qquad \frac{\partial z}{\partial b}=1$

问：当$z=w_1x_1+w_2x_2+b$时，求关于$x1,w2,b$的偏导数

多变量函数的最小值条件

- 光滑的单变量函数 $y=f(x)$ 在点 x 处取得最小值的**必要条件**是：导函数在该点取值 0；
- 对于多变量函数，同样适用
- 函数$z=f(x,y)$取得最小值的必要条件是：$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}=0 \qquad \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}=0$
- 而且可以扩展到n个变量的多变量函数$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$
- 举例： 求函数$z=f(x,y)=x^2+y^2$取得最小值时 x、y 的值
  - 首先求关于x和关于y的偏导数：$\frac{\partial z}{\partial x}=2x \qquad \frac{\partial z}{\partial y}=2y$
  - 函数取得最小值的必要条件是 $x=0$，$y=0$。此时函数值 z 为 0。由于$x^2+y^2\geq 0$，所以我们知道这个函数值 0 就是最小值。
  - 思考下：葡萄酒杯的底部~~



$z=x^2+y^2$ 的图像。

八、复合函数链式求导法则（误差反向传播法）

复杂（复合）函数求导的链式法则。这个法则对于理神经网络中误差反向传播法很有必要

复合函数

已知函数 $y=f(u)$，当 u 表示为 $u=g(x)$ 时，y 作为 x 的函数可以表示为形如 $y=f(g(x))$ 的嵌套结构（u 和 x 表示多变量）。这时，嵌套结构的函数 $f(g(x))$ 称为 $f(u)$ 和 $g(x)$ 的**复合函数。**

神经网络中，多个输入$x_1,x_2,\cdots,x_n$，将 $a(x)$ 作为激活函数，求神经单元的输出 y 的过程如下：

$$y=\alpha(w_1x_1+w_2x_2+\cdots+w_nx_n+b)$$
$$w_1,w_2,\cdots,w_n\text{为各个输入的权重}$$
$$b\text{为神经单元的偏置}$$
$$y\text{即为：}f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\text{多变量一次函数和}\alpha(x)\text{激活函数的复合函数}$$

单变量函数的链式法则

单变量函数 $y=f(u)$，当 u 表示为单变量函数 $u=g(x)$时，复合函数 $f(g(x))$ 的导函数：

$$\frac{dy}{dx}=\frac{dy}{du}\frac{du}{dx}$$

同理：当 y为 u 的函数，u为 v 的函数，v为 x 的单变量函数时：

$$\frac{dy}{dx}=\frac{dy}{du}\frac{du}{dv}\frac{dv}{dx}$$

举例:

有Sigmoid函数和线性函数（w,b是常数，所以u是**单变量函数**）:

$$y=\frac{1}{1+e^{-u}} \quad , \quad u=wx+b$$
$$y=f(g(x))=\sigma(wx+b)$$

求: $\frac{dy}{dx}$ ？

有：Sigmoid函数的导数公式：$\sigma'(x)=\sigma(x)(1-\sigma(x))$

$$\sigma'(u)=\sigma(u)(1-\sigma(u))$$
$$\frac{dy}{du}=y(1-y)$$
$$\frac{du}{dx}=w$$

得到:

$$\frac{dy}{dx}=\frac{dy}{du}\frac{du}{dx}=y(1-y)w=\frac{w}{1+e^{-(wx+b)}}[1-\frac{1}{1+e^{-(wx+b)}}]$$

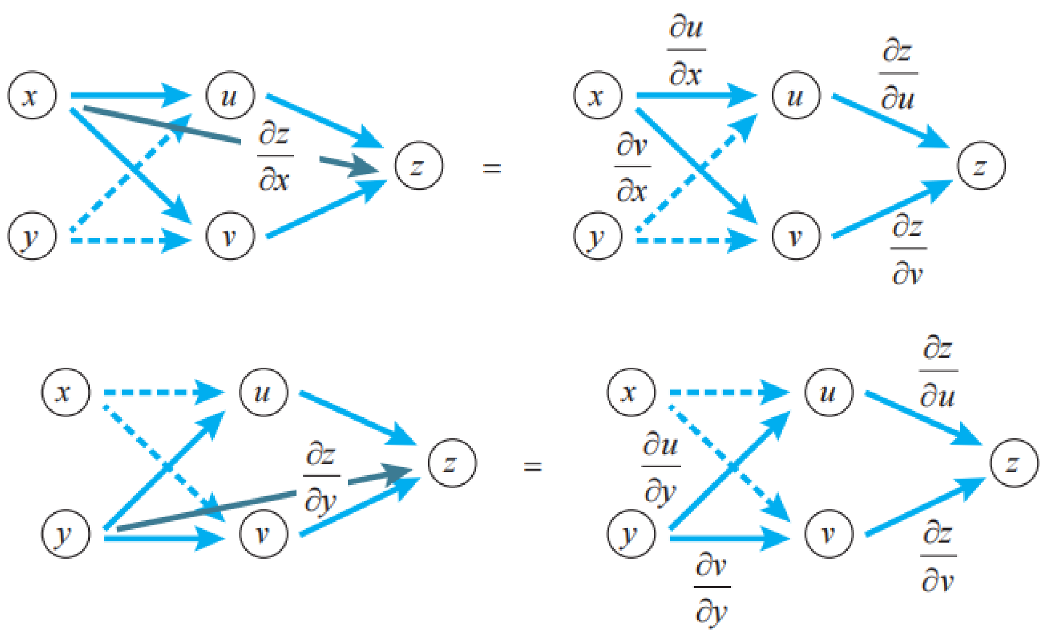
多变量函数的链式法则

在多变量函数的情况下，链式法则的思想也同样适用。只要像处理分数一样对导数的式子进行变形即可。然而事情并没有这么简单，因为必须对相关的全部变量应用链式法则。

变量 z 为 u、v 的函数 $z=f(u,v)$，如果 u、v 分别为 x、y 的函数$u=g(x,y),v=h(x,y)$，则 z 为 x、y的函数$z=f(g(x,y),h(x,y))$，此时下式（多变量函数的链式法则）成立。

$$\frac{\partial z}{\partial x}=\frac{\partial z}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial z}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial x} \qquad (求偏导)$$
$$\frac{\partial z}{\partial y}=\frac{\partial z}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial z}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial y}$$

即：变量 z 为 u、v 的函数，u、v 分别为 x、y 的函数，z 关于 x 求导时，先对 u、v 求导，然后与 z 的相应导数相乘，最后将乘积加起来。如图:



三个以上的多变量函数的情况下也同样成立！

九、多变量函数的近似公式（梯度下降的基础）

梯度下降法是确定神经网络的一种代表性的方法。在应用梯度下降法时，需要用到多变量函数的近似公式。

单变量函数的近似公式

已知导数定义：

$$f'(x)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}$$

将Δx这个"无限趋于0"或者说"无限小"的量，替换成"微小"的量，得到：

$$f'(x)\approx\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}$$

整理得：

$$f(x+\Delta x)\approx f(x)+f'(x)\Delta x$$

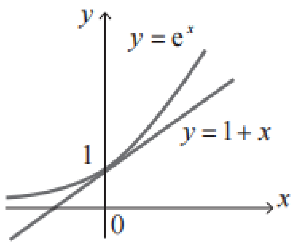
这个就是，**单变量函数的近似公式**，这里Δx是"微小得数"

举例：$y=f(x)=e^x$ ，求其 $x=0$ 附近 得近似公式

$$\begin{gathered}(e^x)'=e^x\\ e^{x+\Delta x}\approx e^x+e^x\Delta x\\ x\to 0\\ e^x\approx 1+\Delta x\approx 1+x\end{gathered}$$

得到：$y=e^x$ 和其在$x\to 0$时得近似函数 $y=1+x$

如图：



在 $x=0$ 附近，$y=e^x$ 与 $y=1+x$ 的图像重叠。

多变量函数的近似公式

将单变量函数的近似公式扩展到两个变量的函数。如果x、y 作微小的变化，那么函数 $z=f(x,y)$ 的值将会怎样变化呢？答案就是**多变量函数近似公式**。Δx、Δy 为微小的数。

$$f(x+\Delta x，\ y+\Delta y)\approx f(x,y)+\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}\Delta x+\frac{\partial f(x,y)}{\partial y}\Delta y$$

化简一下：定义$\Delta z=f(x+\Delta x，\ y+\Delta y)-f(x,y)$ 得到：

$$\Delta z\approx\frac{\partial z}{\partial x}\Delta x+\frac{\partial z}{\partial y}\Delta y$$

通过这样的简化方式，就很容易将近似公式进行推广到哪个变量$x_1, x_2, \cdots, x_n$。

例如，变量 z为四个变量 w, x, y, b的函数时，近似公式如下所示

$$\Delta z \approx \frac{\partial z}{\partial w}\Delta w + \frac{\partial z}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial z}{\partial y}\Delta y + \frac{\partial z}{\partial b}\Delta b$$

近似公式的向量表示

如上，四个变量的函数的近似公式，可以表示为如下两个向量的内积：（复习一下向量内积的坐标表示）

$$\text{梯度向量：} \nabla\alpha = (\frac{\partial z}{\partial w}, \frac{\partial z}{\partial x}, \frac{\partial z}{\partial y}, \frac{\partial z}{\partial b})$$
$$\text{位移向量：} \Delta\beta = (\Delta w, \Delta x, \Delta y, \Delta b)$$

对于一般的 n 变量函数，近似公式也可以像这样表示为内积的形式

十、梯度下降法的含义与公式

应用数学最重要的任务之一就是寻找函数取最小值的点。研究一下著名的寻找最小值的点的方法——梯度下降法

主要通过两个变量的函数来展开。在神经网络的计算中，往往需要处理成千上万个变量，但其数学原理和两个变量的情形是相同的

梯度下降法的思路

1. 已知函数 $z = f(x, y)$，怎样求使函数取得最小值的 x、y 呢？最有名的方法就是利用“使函数 $z = f(x, y)$ 取得最小值的 x、y 满足以下关系”：

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = 0 \qquad \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} = 0$$

2. 然而，在实际问题中，联立上面的方程式通常不容易求解
3. 梯度下降法是一种具有代表性的替代方法。该方法不直接求解上面的方程，而是通过慢慢地移动图像上的点进行摸索，从而找出函数的最小值。
4.

向量内积的回顾

两个固定大小的非零向量 $\vec{a}$、$\vec{b}$。当 $\vec{b}$ 的方向与 $\vec{a}$ 相反时，内积 **a** · **b** 取最小值

换句话说，当向量 $\vec{b}$ 满足 $\vec{b} = -k\vec{a}$ 时，可以使得内积 **a** · **b** 取最小值

二变量函数的梯度下降法的基本式

$$(\Delta x, \Delta y) = -\eta(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}, \frac{\partial f(x,y)}{\partial y})$$

利用关系式 (5)，如果从点(x, y)向点($x + \Delta x$, $y + \Delta y$)移动，就可以从图像上点 (x, y) 的位置最快速地下坡。

定义来了，向量$(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}, \frac{\partial f(x,y)}{\partial y})$称为函数$f(x, y)$在点$(x, y)$处的**梯度（gradient）**

举例：设 Δx、$\Delta\ y$ 为微小的数。在函数 $z = x^2 + y^2$ 中，当 x 从 1 变到 $1 + \Delta x$、y 从 2 变到 $2 + \Delta y$ 时，求使这个函数减小得最快的向量 $(\Delta x, \Delta y)$。

解：

有：$(\Delta x, \Delta y) = -\eta(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}, \frac{\partial f(x,y)}{\partial y})$

有：$z = f(x,y) = x^2 + y^2$

得：$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = 2x$ ，$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y} = 2y$

有：$(x,y) = (1,2)$，从（1，2）出发

使得函数$f(x,y)$减小最快的向量是：$-\eta(2,4)$

梯度下降法及其用法

二变量函数的梯度下降法：

步骤1：利用$(\Delta x, \Delta y) = -\eta(\frac{\partial f(x,y)}{\partial x}, \frac{\partial f(x,y)}{\partial y})$找到函数$f(x,y)$减小最快的方向$(\Delta x, \Delta y)$

步骤2：从点 (x,y) 向点（$x+\Delta x, y+\Delta y$）移动，到达新的点(x,y)

步骤3：重复步骤1和步骤2，反复运算，得到$f(x,y)$的最小值

将梯度下降法推广到三个变量以上的情况

梯度下降法基本式：

$$(\Delta x_1, \Delta x_2, \cdots, \Delta x_n) = -\eta(\frac{\partial n f(x_1, x_2, \cdots, x_n)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x_1, x_2, \cdots, x_n)}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f(x_1, x_2, \cdots, x_n)}{\partial x_n})$$

注意，左边的向量也称为位移向量，可以简写成Δx，右边的向量可以简写成：哈密顿算子 ∇f

得到梯度下降法基本式的**简洁写法**：

$$\Delta x = -\eta \nabla f$$

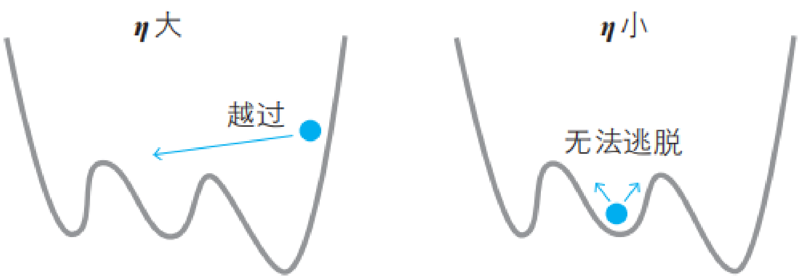
再注意：

η 的含义以及梯度下降法的要点

η 可以看作人移动时的“步长”，根据 *η* 的值，可以确定下一步移动到哪个点。

如果步长较大，那么可能会到达最小值点，也可能会直接跨过了最小值点（左图）。

而如果步长较小，则可能会滞留在极小值点（右图）



在神经网络的世界中，*η* 也称为学习率。遗憾的是，它的确定方法没有明确的标准，只能通过反复试验来寻找恰当的值。

说明1：梯度下降法也可以用于单变量函数，只要梯度向量解释为一维向量（$n = 1$）的情况就可以了。也就是说，将偏导数替换为导数，将得到的下式作为梯度下降法的基本式。$\Delta x = -\eta f'(x)$　（*η* 为正的微小常数）

说明2：将 η 看作步长，实际上这并不严谨，正确的说法是，位移向量的大小才是步长。不过，虽然人的步长大体上是固定的，但梯度下降法的“步长”是不均匀的。因为梯度在不同的位置大小不同。因此，在应用数学的数值计算中，有时会对梯度下降法的基本式进行其他变形~~。

十一、用Excel体验梯度下降法

梯度下降法　（例）$z=x^2+y^2$

η	0.1

No	位置		梯度		位移向量		函数值
i	x_i	y_i	$\partial z/\partial x$	$\partial z/\partial y$	Δx	Δy	z
0	3.00	2.00	6.00	4.00	-0.60	-0.40	13.00
1	2.40	1.60	4.80	3.20	-0.48	-0.32	8.32
2	1.92	1.28	3.84	2.56	-0.38	-0.26	5.32
3	1.54	1.02	3.07	2.05	-0.31	-0.20	3.41
4	1.23	0.82	2.46	1.64	-0.25	-0.16	2.18
5	0.98	0.66	1.97	1.31	-0.20	-0.13	1.40
6	0.79	0.52	1.57	1.05	-0.16	-0.10	0.89
7	0.63	0.42	1.26	0.84	-0.13	-0.08	0.57
8	0.50	0.34	1.01	0.67	-0.10	-0.07	0.37
9	0.40	0.27	0.81	0.54	-0.08	-0.05	0.23
10	0.32	0.21	0.64	0.43	-0.06	-0.04	0.15
11	0.26	0.17	0.52	0.34	-0.05	-0.03	0.10
12	0.21	0.14	0.41	0.27	-0.04	-0.03	0.06
13	0.16	0.11	0.33	0.22	-0.03	-0.02	0.04
14	0.13	0.09	0.26	0.18	-0.03	-0.02	0.03
15	0.11	0.07	0.21	0.14	-0.02	-0.01	0.02
16	0.08	0.06	0.17	0.11	-0.02	-0.01	0.01
17	0.07	0.05	0.14	0.09	-0.01	-0.01	0.01
18	0.05	0.04	0.11	0.07	-0.01	-0.01	0.00
19	0.04	0.03	0.09	0.06	-0.01	-0.01	0.00
20	0.03	0.02	0.07	0.05	-0.01	0.00	0.00
21	0.03	0.02	0.06	0.04	-0.01	0.00	0.00
22	0.02	0.01	0.04	0.03	0.00	0.00	0.00
23	0.02	0.01	0.04	0.02	0.00	0.00	0.00

梯度下降法

十二、最优化问题和回归分析

从数学上来说，确定神经网络的参数是一个最优化问题，具体就是对神经网络的参数（即权重和偏置）进行拟合，使得神经网络的输出与

实际数据相吻合。

为了理解最优化问题，最浅显的例子就是回归分析。

什么是回归分析

由多个变量组成的数据中，着眼于其中一个特定的变量，用其余的变量来解释这个特定的变量，这样的方法称为回归分析。回归分析的种类有

很多。

最简单的**一元线性回归分析**，以两个变量组成的数据作为考察对象，用一条直线近似地表示右图所示的散点图上的点列，通过该直线的方程来考察两个变量之间的关系。该直线称为**回归直线**

有训练数据如下：

身高（x）	体重（y）
174.1	61.5
...	...
177.8	66.1

回归方程，x是自变量，y是因变量，模型（model）： $y = wx + b$

训练数据：自变量x_i，因变量 y_i

预测值：$\hat{y} = wx + b$

预测值和实际测试数据的误差：$y_i - \hat{y_i} = y_i - (wx_i + b)$

平方误差：$C_i = \frac{1}{2}(y_i - (wx_i + b)^2)$

平方误差和（损失函数，代价函数）：$loss(x, y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}(y_i - (wx_i + b))^2$

在这个简单的线性回归中，我们的目标是：找到合适的w, b，尽可能让损失函数$loass(x, y)$取最小值0，即：

$$\frac{\partial loss(x, y)}{\partial w} = 0 \qquad \frac{\partial loss(x, y)}{\partial b} = 0$$

根据复合函数链式偏导法则，得到：

$$\frac{\partial loss(x, y)}{\partial w} = \sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - (wx_i + b)) = 0$$
$$\frac{\partial loss(x, y)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} -(y_i - (wx_i + b)) = 0$$

联立求解w, b

综上，机器学习过程中

步骤1：确定了模型（线性回归直线模型中只有两个参数w, b），即，根据身高和体重的训练数据去找到预测体重的回归直线方程

步骤2：通过大量训练数据求累加和，使其等于0（或趋近于0），联立求解，得到模型中的参数w, b，完成机器学习

注意1：当模型中参数增多，要提供更多的训练数据，数据规模

注意2：训练数据的采集和使用前，要预先进行数据标准化和数据清洗

注意3：损失函数有很多种形式，本例中损失函数是平方误差总和（最小二乘法），最小值为0，本例中代价函数关于w和b两个参数求偏导，如果参数量巨大会怎样？

十三、概率论

概率论是研究不确定的学科。

概率论是现有许多人工智能算法的基础。现阶段的很多人工智能算法都是数据驱动的，且目的大多为了做预测或是作出更好的决策。如：

- 机器翻译中，如何检测你输入的语言种类。一种简单的方法就是把你输入的词或句子进行分解，计算各语言模型的概率，然后概率最高的是最后确定的语言模型。
- 用神经网络进行图像分类，网络的输出是衡量分类结果可信程度的概率值，即分类的置信度，我们选择置信度最高的作为图像分类结果。
- 混合高斯模型、隐马尔科夫模型等传统语音处理模型都是以概率论为基础的

随机试验

满足以下三个特点的试验称为随机试验：

- 可以在相同的条件下重复进行。
- 每次试验的可能结果不止一个，并且能事先明确试验的所有可能结果。
- 进行一次试验之前不能确定哪一个结果会出现。

样本点、样本空间、随机事件

- 样本点：一次随机试验所有可能结果的集合是**样本空间**，而随机试验中的每个可能结果称为**样本点**。
- 随机事件：随机试验的某个或某些样本点组成的集合，常用大写字母表示。
- 举例：
  - 随机试验E_1：扔一次骰子，观察可能出现的点数情况。
  - 扔一次骰子点数出现情况样本空间为：S = {1，2，3，4，5，6}。
  - 扔一次骰子样本点（可能的结果）为：e_i =1，2，3，4，5，6。
  - 随机事件A_1：“扔一次骰子出现的点数为5”，即A_1=$\{x \mid x=5\}$。

随机变量

随机变量：本质是一个函数，是从样本空间的子集到实数的映射，将事件转换成一个数值，也就是，一次随机事件的数量化表示。

一些随机试验的结果可能不是数，因此很难进行描述和研究，比如S={正面，反面}。因此将随机试验的每一个结果与实数对应起来，从而引入了随机变量的概念。随机变量用大写字母表示，其取值用小写字母表示。

举例1：随机试验E_2：抛两枚骰子，观察可能出现的点数的和

$$X = X(e) = X(i,\ j) = i + j, \quad (\text{i, j=1, 2, } \cdots\text{, 6})$$

按照随机变量的可能取值，可分为：

离散随机变量：随机变量的全部可能取到的值是有限个或可列无限多个。如：某年某地的出生人数。

连续随机变量：随机变量的全部可能取到的值有无限个，或数值无法一一列举。如：奶牛每天挤出奶的量，可能是一个区间中的任意值

频率派视角下的概率

频数：多次随机试验后，随机变量值中代表某特征的数（某个随机事件）的出现次数。

频率：多次随机试验后，某个随机事件的频数与随机试验总数之比。

做大量重复试验时，随着试验次数的增加，某一随机事件出现的频率，总在一个定值的附近稳定地摆动，便将此定值称为该事件的**概率**。

好玩的经典的布丰投针实验

贝叶斯派视角下的概率

频率派与贝叶斯派的论战：

频率派：客观世界内在地存在随机性，这是自然规律

贝叶斯派：不，本身并没有客观的随机性，只是观察者没有上帝视角

频率派：我们要找出正确的概率模型参数，它是客观存在且唯一正确的

贝叶斯派：既然我们都没有上帝视角了，如何知道哪一个是正确的？

...

对于贝叶斯派而言，他们认为所谓的「随机」，只是由于人没有办法掌握全局信息。

比如，对于有内幕消息的人来说，股市的波动是确定的，对于普通散户而言，股市的波动是随机不确定的

所以，贝叶斯派将「概率」视为对某种结果出现的信任程度，而非频率

频率派

试验必须可以进行很多次（易于操作，成本低，周期短）
缺乏一定的严谨性（如何确定“稳定”与否）
无法对不可多次重复的事件进行预判（毒理学检测, etc）
内在地觉得事件本身是随机的

古典概型

概率学习之路的启蒙者
定义：若一个随机试验包含的基本事件的数量是有限的，且各个基本事件发生的可能性均相等，则此种概率模型称为古典概型
特征：

1. 包含的基本事件数量有限
2. 所有基本事件发生的概率均相等
3. 任意两个基本事件之间是互斥的

   场景：
   - 掷骰子，抛硬币，彩票抽奖，婴儿的出生日期
   - 选择题不会全靠蒙，so many......

计算公式： $P(A)=\frac{m}{n}$ m：A事件包含的基本事件个数，n： 基本事件总数
比如掷骰子：A事件：偶数点数向上， m：是A事件出现的个数
突破极限：
  若某一随机试验的基本事件数量不断增加不断增加......
  古典概型：偶要hold不住了...怎么办......

几何概型：莫慌，俺来了
几何概型粉墨登场……

几何概型

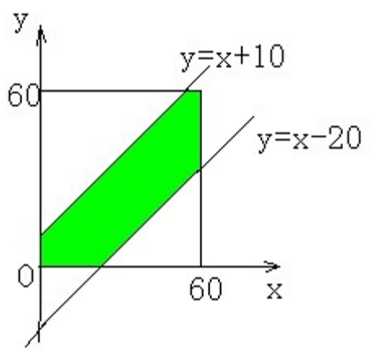
定义：若每个事件发生的概率只与构成该事件区域的度量（长度，面积，体积或度数）成比例，则称这样的概率模型为几何概型。

实质：将古典概型从有限到无限的扩展

特征：

- 包含的基本事件数量无限
- 所有基本事件发生的概率均相等
- 任意两个基本事件之间是互斥的
- 场景：
  - 对于不规则形状面积的测量
  - 相遇问题

    男生和女生相约晚上七点至八点见面，若女生先到，则会等男生十分钟，过时不候；若男生先到，则会等女生二十分钟，过时不候。求他们见上面的概率为多少。



联合概率

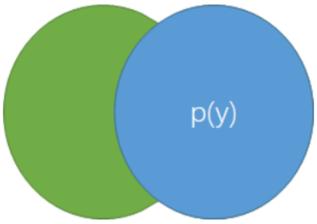
定义：两个或多个事件同时发生的概率
符号表示：P(AB)或P(A,B)
如何计算：

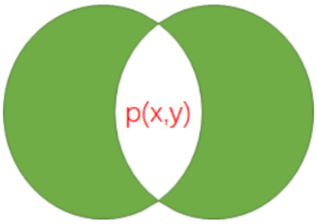
解答：办公室的人数达到多少，至少有两个同事的生日一样的概率大于0.5？
解：考虑某个员工甲，第一个同事和其生日不同的概率为：364/365，
第二个同事和前两个人生日不同的概率为：363/365，
……
以此类推，第N个同事和前面所有人生日不同的概率为：365−N/365，
则所有N个员工生日彼此不同的概率依据联合概率的规则，为：
$P=364/365\times363/365\times\ldots\times365-N/365\leq1/2$
经计算： $N\geq23$

条件概率

定义：事件B已发生的前提下，事件A发生的概率
符号表示：P(A|B)
思辨：条件概率描绘地是B发生的前提下，A发生的概率，那A和B不都是发生了吗？那和联合概率P(AB)不是一样吗？

P(AB)和P(A│B)有什么不同?
两者的"外部环境"不一样；在条件概率的情形下，我们把事件B的发生当做一件已经确定的事，B先已发生了，然后再看A在此情形下发生的概率，所以其概率在计算P(A│B)时视作1；
而在联合概率的情形下，没有哪个事件先发生的说法，没有先决条件，既关注一个事件发生的概率，也关注其它事件发生的概率





数学期望

例：甲乙两人赌博，对于每一局而言，两人获胜的几率都是相等的，比赛为五局三胜制，最终的赢家可以获得100美元的奖励。在第四局比赛开始前，由于特殊情况需终止比赛，而前三局甲赢了两局，乙赢了一局，现在应如何公平地分配这100美元?

性质：

E(C)=C，C为常数
E(CX)=CE(X), C为常数
E(X+Y)=E(X)+E(Y)
E(XY)=E(X)E(Y),当X, Y相互独立时

E(XY)需按照定义去计算，当X,Y不独立时

方差和标准差

度量随机变量和其数学期望之间的偏离程度

$D = \sigma^2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{(X-E(X))^2}{N}$

5/6 + 1