

人工智能数学基础复习

不啻半個世紀

日期: December 25, 2024

本文档是基于 2023-2024 秋季学期王子贺老师开设的人工智能数学基础课程所撰写的，旨在帮助后来的同学们复习这门知识范围广、难度高的课程。（不过不用担心，王子贺老师还是非常仁慈的（^ v ^），大家认真复习就好）此外，由于课程每年内容的变化和本人对课程记忆的淡忘，文档仅供参考，希望能帮助到大家。

1 微分

本节主要是掌握计算方法，基础性较强，在考题中往往结合其他题目出现。

1.1 一元函数

- 连续 微分 导数 链式法则
- 泰勒级数 麦克劳林级数

Q: 解析的函数 f 的定义是什么？

1.2 多元函数

- 极限 连续
- 偏导数 全微分 导数
 - 一元函数：可导 = 可微
 - 多元函数：可导 \Rightarrow 可微
 - 连续必可微

Q: 求 $f(x, y) = x \ln(x^3 + 4xy^2 + y^3)$ 的全微分

- 方向导数
- 链式法则

Q: 设 $x = t^2, y = \cos t, f(x, y) = x \ln y + 4xy$, 求 $\frac{df}{dt}$

- 梯度

Q: 设 $x = t \sin s, y = t^2 \cos s, f(x, y) = xy + \ln y$, 求 $\frac{df}{d(s, t)^T}$

1.3 向量值函数的梯度

- 雅可比矩阵 分子/分母布局（注意不同向量值函数梯度的维度大小）

- 向量值函数的梯度求解
- Q:** 求解 MSE 的闭式解 (即求解 $\arg \min_{\omega} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\omega\|_2^2$)

1.4 矩阵的梯度

- 矩阵关于向量的梯度
- 矩阵关于矩阵的梯度
- 几个重要的梯度
- Q:** 设 $f(\mathbf{A}) = \text{tr}(\mathbf{A}^T \mathbf{B} \mathbf{A})$, 求 $\frac{df}{d\mathbf{A}}$

1.5 神经网络中的梯度

本节在 2023 年只介绍了反向传播与自动微分机制, 感兴趣的同学可以了解前馈网络和反向传播的计算方法, 但事实上这部分 2023 年没考。

1.6 高阶导数

- 高阶偏导
- 海森矩阵
- 多变量泰勒展开
- Q:** 设 $f(x, y) = x^2y + 2xy - y^3$, 求 f 在 $(2, 1)$ 的泰勒展开

1.7 微分方程

2023 年没讲, 感觉不像重点

2 优化

期末重点之一, 难度并不算高, 考察计算为主, 请务必掌握凸函数的定义、拉格朗日乘子法、牛顿迭代法

2.1 凸优化问题

- 凸集保凸运算
- 凸函数 (重点)
 - 定义
 - 充要条件
 - 保凸运算

这部分考了填空和大题各一道, 笔者有些淡忘但下面的练习是大概类似的考点, 难度也较为相似:

Q1: $f_1(x, y) = x^2y - 2xy + y^3$, $f_2(x, y) = xe^y$, $f_3(x, y) = x \ln(x-y)$, $f_4(x, y) = x^2 - 2xy + y^2$, 上面函数中, 凸函数是_, 凹函数是_, 非凸非凹函数是_。

Q2: 假设 $f(x)$ 是凸函数, 且 $g(x)$ 单调递增。证明 $h(x) = f(g(x))$ 仍是凸函数。

Q3: 假设 $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$ 是凸函数, 权重 $w_i > 0$, 且满足 $\sum_{i=1}^m w_i = 1$ 。证明函数 $g(x) = \sum_{i=1}^m w_i f_i(x)$ 是凸函数。

- 下水平集上镜图

虽然感觉不像是重点, 但去年期末填空考了上镜图的定义, 大家还是尽量记住定义, 笔者虽然没记住但是考试绞尽脑汁写了个差不多的意思的, 遂答对

- 优化问题凸优化问题

- 定义
- 局部最优 = 全局最优
- 最优解充要条件

2.2 Lagrange 对偶函数

- Lagrange 函数

- Lagrange 对偶函数

Q: 设问题为 $\min x_1^2 - x_1 x_2 + x_2^2$, 有约束条件 $x_1^2 + x_2^2 \leq 1$, $x_1 + x_2 = 1$, 求 Lagrange 函数和对偶函数。

2.3 对偶问题

- 原问题与对偶问题
- 弱对偶性与强对偶性

2.4 最优性条件

- 互补松弛性
- KKT 条件 (重点)

Q: 设问题为 $\min x_1^2 + 2x_2^2 + x_3^2$, 有约束条件 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1$, $x_1 + x_2 + x_3 = 1$, 求其最优解和最优值。

2.5 经典凸优化问题

试题里面一般都考凸优化, 特别是线性规划和二次规划, 要尽可能掌握凸优化的 lagrange 乘子法。但本节不重要

2.6 凸优化算法

- 无约束优化 梯度下降 回溯直线搜索
- 牛顿法 (重点)

去年考察了一道大题, 下面是一道类似的题目

Q: 设 $f(x_1, x_2) = x_1^2 - 2x_1 x_2 + 3x_2^2$, 请回答下面的问题: (1) 求 $f(x)$ 的海森矩阵, 并说明

其极值的情况 (2) 求 $f(x)$ 在 $(1, 2)$ 处的泰勒展开 (3) 以 $\mathbf{x}_0 = (1, 2)$ 为初始点, 计算牛顿法迭代两次的结果。

- 其他方法

3 概率

期末考试的重难点, 也是复习的大头, 需着重复习

3.1 单变量

- 期望 方差
- 交叉熵 KL 散度 互信息

去年似乎也考察了这部分内容, 难度不高, 需要注意的是与熵相关的题目

Q: 给定联合概率分布 $p(x, y)$ 如下:

$X \backslash Y$	0	1
0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
1	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$

其中 $p(x, y)$ 表示 X 和 Y 的联合分布。

请计算以下四个量:

- (a) $H(X), H(Y)$
- (b) $H(X|Y), H(Y|X)$
- (c) $H(X, Y)$
- (d) $I(X; Y)$

3.2 多变量

基本与概统类似

- 联合分布 联合密度函数
- 边际分布 独立 条件期望
- 协方差 相关系数

3.3 高斯分布

- 多元正态分布

填空考察了给定正态分布的概率密度函数, 求均值和方差

Q: 给定多元正态分布

$$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\sqrt{5}} \exp \left(-\frac{1}{2} \left[\frac{3}{5}(x_1 - 3)^2 + \frac{6}{5}(x_1 - 3)(x_2 - 5) + \frac{3}{5}(x_2 - 5)^2 \right] \right).$$

其均值和方差分别为?

- 变量组合

若 $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathbf{x}}, \Sigma_{\mathbf{x}})$, $\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathbf{y}}, \Sigma_{\mathbf{y}})$, 则 $a\mathbf{x} + b\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(a\mu_{\mathbf{x}} + b\mu_{\mathbf{y}}, a^2\Sigma_{\mathbf{x}} + b^2\Sigma_{\mathbf{y}})$

若 $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathbf{x}}, \Sigma_{\mathbf{x}})$, $\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathbf{y}}, \Sigma_{\mathbf{y}})$, 则 $\mathbf{x}|\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathbf{x}|\mathbf{y}}, \Sigma_{\mathbf{x}|\mathbf{y}})$

若 $\mathbf{x} \sim \mathcal{N}(\mu_{\mathbf{x}}, \Sigma_{\mathbf{x}})$, $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$, 则 $\mathbf{y} \sim \mathcal{N}(\mathbf{A}\mu_{\mathbf{x}}, \mathbf{A}\Sigma_{\mathbf{x}}\mathbf{A}^T)$

但是需注意 $\alpha p(x) + (1 - \alpha)p(y)$ 不服从正态分布

- 协方差 相关系数

3.4 统计推断

考试中相关部分似乎涉及不多，好像考了简单的 MLE；但是是下学期机器学习的基本知识

- 最大似然

参考概率论与数理统计

- 贝叶斯估计

Q: 设 y_1, y_2, \dots, y_n 是来自正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$ 的样本，其中 σ^2 已知， μ 未知。假设 μ 的先验分布为均匀分布 $\text{Uniform}(a, b)$ ，即 μ 在区间 $[a, b]$ 内均匀分布，且 a 和 b 已知。试求 μ 的贝叶斯估计。

3.5 共轭分布

去年没考，下学期的机器学习会部分涉及到

- 共轭分布

若后验与先验分布相同，则先验与似然共轭分布

- 指数族分布充分统计量

指数族分布都有共轭分布

3.6 概率不等式

- 马尔可夫不等式 切比雪夫不等式

概统的重点，但去年只涉及了简单的马尔可夫不等式

- 切尔诺夫界 霍夫丁界

没考

3.7 高维数据

3.7.1 几何特性

- 单位球 表面积 体积

- 体积分布

定理：对于 $c \geq 1, d \leq 3$, 至少 $1 - \frac{2}{c}e^{-\frac{c^2}{2}}$ 比例的体积有 $x_1 \leq \frac{c}{\sqrt{d-1}}$

- 随机采样

近似正交性：从 d 维单位球中均匀采样 n 个点 x_1, \dots, x_n , 以至少 $1 - O(\frac{1}{n})$ 的概率满足

$$|x_i \cdot x_j| \leq \frac{\sqrt{6 \ln n}}{d-1}, \text{ for } i, j \in [1, n]$$

3.7.2 概率特性

- 均匀分布

23 年拔尖班必做题：如何从一元标准正态分布得到 d 维单位球面的标准正态分布

Q: 当时考试的部分同学从极坐标的角度进行了回答，请问这样做有什么问题？

- 高斯分布

高斯环定理：在 d 维高斯空间中，每一维的方差都是 1，对于 $\beta \leq \sqrt{d}$ ，至多有 $3e^{-c\beta^2}$ 的概率分布于环 $\sqrt{d} - \beta \leq |x| \leq \sqrt{d} + \beta$ 之外。

Q: $E(|x|) = ?$

3.8 数据降维

- 随机投影定理
- JL 算法

23 年第一道大题：简述 JL 算法

3.9 采样

- 基本采样算法
- 拒绝采样 自适应拒绝采样
- 重要性采样
- MCMC

似乎是第二道大题，第一问简述 MCMC 算法的流程，第二问计算马尔科夫链的稳态分布，与下面的题目类似：

Q: 假设我们有两个离散随机变量 X_1 和 X_2 ，它们的状态空间分别为 $X_1 \in \{1, 2, 3\}$ 和

$X_2 \in \{1, 2\}$ 。其中，状态转移概率分别为 $\begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.2 & 0.8 \end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix} 0.1 & 0.7 & 0.2 \\ 0.2 & 0.4 & 0.4 \\ 0.4 & 0.4 & 0.2 \end{pmatrix}$

(1) 假设我们使用 Metropolis-Hastings 算法进行采样，请简述该算法的基本流程。

(2) 计算该马尔科夫链的稳态分布 π 。

- 高斯分布采样

逆变换法 Box-Muller Marsaglia polar

没考但感觉也是重点

4 算法

该部分 2023 年未教授。