第二章补充 微分熵

微分熵预备知识

定义

1. **随机变量 X 的均值** μ:
   - 定义为

$$\mu = E(X) = \int x f(x) dx$$

   其中 $f(x)$ 为 X 的概率密度函数。
2. **随机变量 X 的方差**:
   - 定义为

$$\begin{aligned} Var(X) &= E(X - EX)^2 \\ &= E(X-\mu)^2 \\ &= E(X^2 - 2X\mu + \mu^2) \\ &= E(X^2) - \mu^2 \end{aligned}$$

3. **两个随机变量 X 和 Y 之间的协方差**:
   - 定义为

$$Cov(X,Y)=E(X-EX)(Y-EY)=E(XY)-\mu_X\mu_Y$$

4. **对于随机变量 $\vec{X}=[X_1,X_2,\cdots,X_n]^T$（列向量）**：
   - 其**协方差矩阵**定义为

$$K_{\vec{X}}=E(\vec{X}-E\vec{X})(\vec{X}-E\vec{X})^T=[Cov(X_i,X_j)]$$

   - 其**相关矩阵**定义为

$$\widetilde{K}_{\vec{X}}=E(\vec{X}\vec{X}^T)=[E(X_iX_j)]$$

   - 若 $E(\vec{X})=\vec{\mu}=\vec{0}$，则 $K_{\vec{X}}=\widetilde{K}_{\vec{X}}$
5. **高斯分布**

- 令 $N(\mu,\sigma^2)$ 表示均值为 μ，方差为 σ^2 的**高斯（正态）分布**，即它的概率密度函数为

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

- 令 $N(\vec{\mu},K)$ 表示均值为 $\vec{\mu}$，协方差矩阵为 K 的**多元高斯分布**，即对所有的 $\vec{x}\in R^n$，其联合概率密度函数为

$$f(\vec{x})=\frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n|K|^{\frac{1}{2}}}e^{-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{\mu})^TK^{-1}(\vec{x}-\vec{\mu})}$$

  其中 $|K|$ 表示 K 的行列式值，K 是正定对称矩阵。

基本结论

- 以下是关于矩阵和随机变量的线性变换的基本结论。所有的量和相关矩阵都假定为实值

定义

- **定义（对称矩阵）**：如果 $K^T=K$，则称矩阵 K 是对称的。
- **定义（正定矩阵）**：
  - 一个 $n\times n$ 矩阵 K，如果对所有非零 n 维列向量 $\vec{x}$，$\vec{x}^TK\vec{x}>0$ 成立，则称矩阵 K 为正定的；
  - 如果对所有 n 维列向量 $\vec{x}$，$\vec{x}^TK\vec{x}\geq 0$ 成立，则称矩阵 K 为半正定的。

命题

1. **命题1**：
   - **协方差（相关）矩阵是对称且半正定的。**

- 如果矩阵 K 是对称的，则它可以对角化为 $K=Q\Lambda Q^T$。
  其中，Λ 是对角矩阵，Q 和 Q^T 是正交矩阵，即 $Q^{-1}=Q^T$，$|Q|=|Q^T|=1$，$QQ^T=I$。

  $$KQ=(Q\Lambda Q^T)Q=Q\Lambda(Q^TQ)=Q\Lambda$$

  令 λ_i 表示 Λ 的第 i 个对角元素，$\vec{q}_i$ 表示 Q 的第 i 列，则：

  $$\begin{aligned}&K[\vec{q}_1,\vec{q}_2,\cdots,\vec{q}_n]=[\vec{q}_1,\vec{q}_2,\cdots,\vec{q}_n]\begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n\end{bmatrix}\\&K\vec{q}_i=\lambda_i\vec{q}_i\end{aligned}$$

  即 $\vec{q}_i$ 是矩阵 K 对应于特征值 λ_i 的特征向量。

2. **命题2**：
   - **半正定矩阵的特征值是非负的。**
   - **证明**：
     令 K 表示一个半正定矩阵，$\vec{u}$ 是矩阵 K 对应于特征值 λ 的特征向量，即

     $$K\vec{u}=\lambda\vec{u}$$

     由于 K 是半正定的，有

     $$\vec{u}^TK\vec{u}=\vec{u}^T\lambda\vec{u}=\lambda\vec{u}^T\vec{u}\geq 0$$

     又因为 $\vec{u}^T\vec{u}>0$，所以有 $\lambda\geq 0$。
3. **命题3**：
   - 令 $\vec{Y}=A\vec{X}$，其中 $\vec{X}$ 和 $\vec{Y}$ 均为由几个随机变量构成的列向量，A 是 $m\times n$ 矩阵，则

     $$K_{\vec{Y}}=AK_{\vec{X}}A^T$$

     且

     $$\widetilde{K}_{\vec{Y}}=A\widetilde{K}_{\vec{X}}A^T$$

   - **证明**：

$$
\begin{aligned}
K_{\vec{Y}} &= E(\vec{Y}-E\vec{Y})(\vec{Y}-E\vec{Y})^T \\
&= E[A(\vec{X}-E\vec{X})][A(\vec{X}-E\vec{X})]^T \\
&= E[A(\vec{X}-E\vec{X})(\vec{X}-E\vec{X})^T A^T] \\
&= A[E(\vec{X}-E\vec{X})(\vec{X}-E\vec{X})^T]A^T \\
&= AK_{\vec{X}}A^T
\end{aligned}
$$

4. **命题4**
   - 设$\vec{X}$和$\vec{Y}$均为由n个随机变量构成的列向量，且满足

     $$\vec{Y} = Q^T\vec{X}$$

     其中$Q\Lambda Q^T$是$K_{\vec{X}}$（$\vec{X}$的协方差矩阵）的一个对角化。则有

     $$K_{\vec{Y}} = \Lambda$$

     即$\vec{Y}$中的随机变量是不相关的，且$Var(Y_i) = \lambda_i$，λ_i是Λ的第i个对角元素。
   - **证明**:

     $$
     \begin{aligned}
     K_{\vec{Y}} &= Q^T K_{\vec{X}} Q \\
     &= Q^T(Q\Lambda Q^T)Q \\
     &= (Q^T Q)\Lambda(Q^T Q) \\
     &= \Lambda
     \end{aligned}
     $$

   - **推论**：设$\vec{X}$是由n个随机变量构成的列向量，且$Q\Lambda Q^T$是$K_{\vec{X}}$的一个对角化，则

     $$\vec{X} = Q\vec{Y}$$

     其中$\vec{Y} = Q^T\vec{X}$是由n个不相关的随机变量构成的列向量。
     - 证明：

       $$\vec{X} = QQ^T\vec{X} = Q(Q^T\vec{X}) = Q\vec{Y}$$

5. **命题5**
   - 设$\vec{X}$，$\vec{Y}$和$\vec{Z}$是由n个随机变量构成的列向量，$\vec{X}$和$\vec{Z}$相互独立，且$\vec{Y} = \vec{X} + \vec{Z}$，则

     $$K_{\vec{Y}} = K_{\vec{X}} + K_{\vec{Z}}$$

6. **命题6**
   - 设$\vec{Y} = Q\vec{X}$，其中$\vec{X}$和$\vec{Y}$是由n个随机变量构成的列向量，Q是一个正交矩阵，则

     $$E(\sum_{i=1}^{n} Y_i^2) = E(\sum_{i=1}^{n} X_i^2)$$

即随机变量的总能量在正交变换下不变

- **证明**:

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n} Y_i^2 &= \vec{Y}^T\vec{Y} \\
&= (Q\vec{X})^T(Q\vec{X}) \\
&= \vec{X}^T Q^T Q \vec{X} \\
&= \vec{X}^T\vec{X} \\
&= \sum_{i=1}^{n} X_i^2
\end{aligned}
$$

上式两边取期望，得证。

微分熵

微分熵

1. **定义**
   一个概率密度函数为 $f(x)$ 的连续随机变量 X 的微分熵 $h(X)$ 定义为

   $$h(X) = -\int_S f(x)\log f(x)dx = -E\log f(x)$$

   其中 S 为 X 的支撑集，即（$f(x) > 0$，$x \in S$），$h(x)$单位为bit。
2. **均匀分布**
   设 $X \sim U(a,b)$, 即X 服从 $[a,b]$ 上的均匀分布，则

   $$h(X) = -\int_a^b \frac{1}{b-a}\log\frac{1}{b-a}dx = \log(b-a)$$

   若 $b-a<1$，则 $h(X)<0$，因此微分熵可以为负。
3. **正态分布/高斯分布**
   设 $X \sim N(\mu,\sigma^2)$，$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ 。

$$
\begin{aligned}
h(X) &= -\int f(x)\log f(x)dx \\
&= -\int f(x)\left(-\log\sqrt{2\pi\sigma^2} - \frac{x^2}{2\sigma^2}\log e\right)dx \\
&= \frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2)\int f(x)dx + \frac{\log e}{2\sigma^2}\int x^2 f(x)dx \\
&= \frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2) + \frac{1}{2}\log e \\
&= \frac{1}{2}\log(2\pi e\sigma^2)
\end{aligned}
$$

其中

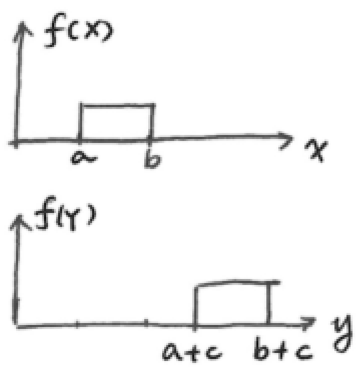
$$\sigma^2 = Var(X) = E(X - E(X))^2 = \int (x-\mu)^2 f(x)dx$$

若$X \sim N(0,\sigma^2)$，$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}$ ，则有 $h(X) = \frac{1}{2}\log(2\pi e\sigma^2)$
其中

$$\sigma^2 = Var(X) = \int x^2 f(x)dx$$

4. **平移性质**

$$h(X+c) = h(X)$$

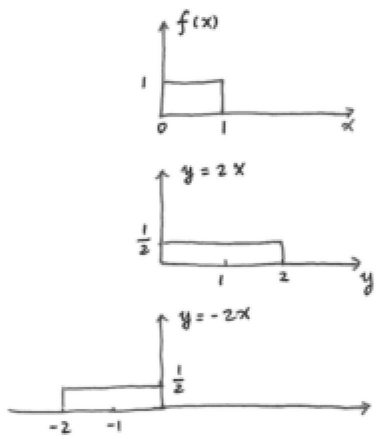
- 

- **证明**:
令 $Y = X + c$，则 $f_Y(y) = f_X(y-c)$ ，且 $S_Y = \{x + c : x \in S_X\}$
将 $x = y - c$ 代入下式:

$$
\begin{aligned}
h(X) &= -\int_{S_X} f_X(x)\log f_X(x)dx \\
&= -\int_{S_Y} f_X(y-c)\log f_X(y-c)dy \\
&= -\int_{S_Y} f_Y(y)\log f_Y(y)dy \\
&= h(Y) \\
&= h(X+c)
\end{aligned}
$$

5. **缩放性质**

$$
\text{对}a \neq 0\text{，有}h(aX) = h(X) + \log|a|
$$

- 

- **证明**:
  令 $Y = aX$，则 $f_Y(y) = \frac{1}{|a|}f_X(\frac{y}{a})$，且 $S_Y = \{ax : x \in S_X\}$。
  将 $x = \frac{y}{a}$ 代入 $h(X)$ 的表达式:

$$
\begin{aligned}
h(X) &= -\int_{S_X} f_X(x)\log f_X(x)dx \\
&= -\int_{S_Y} f_X(\frac{y}{a})\log f_X(\frac{y}{a})\frac{dy}{|a|} \\
&= -\int_{S_Y} |a|f_Y(y)\log(f_Y(y)|a|)\frac{1}{|a|}dy \\
&= -\int_{S_Y} f_Y(y)(\log f_Y(y) + \log|a|)dy \\
&= -\int_{S_Y} f_Y(y)\log f_Y(y)dy - \log|a|\int_{S_Y} f_Y(y)dy \\
&= h(Y) - \log|a| \\
&= h(aX) - \log|a|
\end{aligned}
$$

移项可得 $h(aX) = h(X) + \log|a|$

联合微分熵，条件微分熵及互信息

1. **定义（联合微分熵）**
   联合概率密度函数为 $f(\vec{x})$ 的随机向量 $\vec{x}$ 的联合微分熵 $h(\vec{x})$ 定义为

$$h(\vec{x}) = -\int_S f(\vec{x})\log f(\vec{x})d\vec{x} = -E\log f(\vec{x})$$

   如果 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 相互独立，则有

$$h(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{n} h(X_i)$$

2. **平移**
   令 $\vec{c}$ 是 $\mathbb{R}^n$（n 维实数空间）中的一个列向量，则

$$h(\vec{x} + \vec{c}) = h(\vec{x})$$

3. **缩放**
   令 A 是一个 $n \times n$ 的非奇异矩阵，则

$$h(A\vec{x}) = h(\vec{x}) + \log|\det(A)|$$

4. **多元高斯分布**
   设 $\vec{X} \sim N(\vec{\mu}, K)$ 。
   令 $N(\vec{\mu}, K)$ 表示均值为 $\vec{\mu}$，协方差矩阵为 K 的多元高斯分布，即对于所有 $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ ，其联合概率密度函数为：

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^n|K|^{\frac{1}{2}}}e^{-\frac{1}{2}(\vec{x}-\vec{\mu})^T K^{-1}(\vec{x}-\vec{\mu})}$$

   其中 K 是正定对称矩阵，$|K|$ 表示 K 的行列式值，$\vec{x}, \vec{\mu}$ 为列向量。
   其微分熵 $h(\vec{X})$ 为：

$$h(\vec{X}) = \frac{1}{2}\log[(2\pi e)^n|K|]$$

   这里 $|K|$ 为 K 的行列式值。

   - **证明**：
     设 K 可以对角化为 $Q\Lambda Q^T$ ，记 $\vec{X} = Q\vec{Y}$ ，其中 $\vec{Y}$ 中的随机变量不相关，且有

$Var(Y_i) = \lambda_i$，为 Λ 中第 i 个对角元素。由于 $\vec{X}$ 是高斯的，所以 $\vec{Y}$ 也是高斯的。又由于 $\vec{Y}$ 中的随机变量是不相关的，可知它们相互独立。

$$\begin{aligned}
h(\vec{X}) &= h(Q\vec{Y}) \\
&= h(\vec{Y}) + \log|\det(Q)| \\
&= h(\vec{Y}) + 0 \\
&= \sum_{i=1}^{n} h(Y_i) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\log(2\pi e\lambda_i) \\
&= \frac{1}{2}\log[(2\pi e)^n \prod_{i=1}^{n}\lambda_i] \\
&= \frac{1}{2}\log[(2\pi e)^n|\Lambda|] \\
&= \frac{1}{2}\log[(2\pi e)^n|K|]
\end{aligned}$$

5. **定义（条件微分熵）**
   如果 X，Y 的联合密度函数为 $f(x,y)$，定义条件微分熵 $h(X|Y)$ 为：

$$h(X|Y) = -\int f(x,y)\log f(x|y)dxdy$$

   由于 $f(x|y) = f(x,y)/f(y)$，所以有：

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

6. **定义（相对熵）**
   两个密度函数 f 和 g 之间的相对熵 $D(f||g)$ 定义为：

$$D(f||g) = \int f\log\frac{f}{g}$$

7. **定义（互信息）**
   联合概率密度函数为 $f(x,y)$ 的两个随机变量间的互信息 $I(X;Y)$ 定义为：

$$I(X;Y) = \int f(x,y)\log\frac{f(x,y)}{f(x)f(y)}dxdy$$

   显然有：

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

以及：

$$I(X;Y) = D(f(x,y)||f(x)f(y))$$

8. **定理：相对熵的非负性**

$$D(f||g) \geq 0$$

- **证明**：
  设 f 的支撑集是 S

$$\begin{aligned}-D(f||g) &= \int_S f \log \frac{g}{f} \\ &\leq \log \int_S f \frac{g}{f} \quad \text{(Jensen 不等式)} \\ &= \log \int_S g \\ &\leq \log 1 = 0\end{aligned}$$

- **推论**：
  - $I(X;Y) \geq 0$，当且仅当 X 与 Y 相互独立等号成立。
  - $h(X|Y) \leq h(X)$。

9. **定理(链式法则)**

$$h(X_1, X_2, X_3, \cdots, X_n) = \sum_{i=1}^{n} h(X_i|X_1, X_2, \cdots, X_{i-1})$$

- **推论**：
  - $h(X_1, X_2, \cdots, X_n) \leq \sum_{i=1}^{n} h(X_i)$

10. **Hadamard 阿达玛不等式**
  设 $\vec{X} \sim N(0, K)$ 是一个多元正态分布。
  则有

$$\begin{aligned}h(X_1, X_2, \cdots, X_n) &= \frac{1}{2}\log((2\pi e)^n |K|) \\ &\leq \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\log(2\pi e K_{ii}) \\ &= \frac{1}{2}\log((2\pi e K_{11} \times 2\pi e K_{22} \times \cdots \times 2\pi e K_{nn}))\end{aligned}$$

即 $|K| \le \prod_{i=1}^{n} K_{ii}$

- 注意有关行列式的不等式可以由信息论中的不等式推导而得到。