

# 14

## Sequences

## 数列

也是一种特殊函数



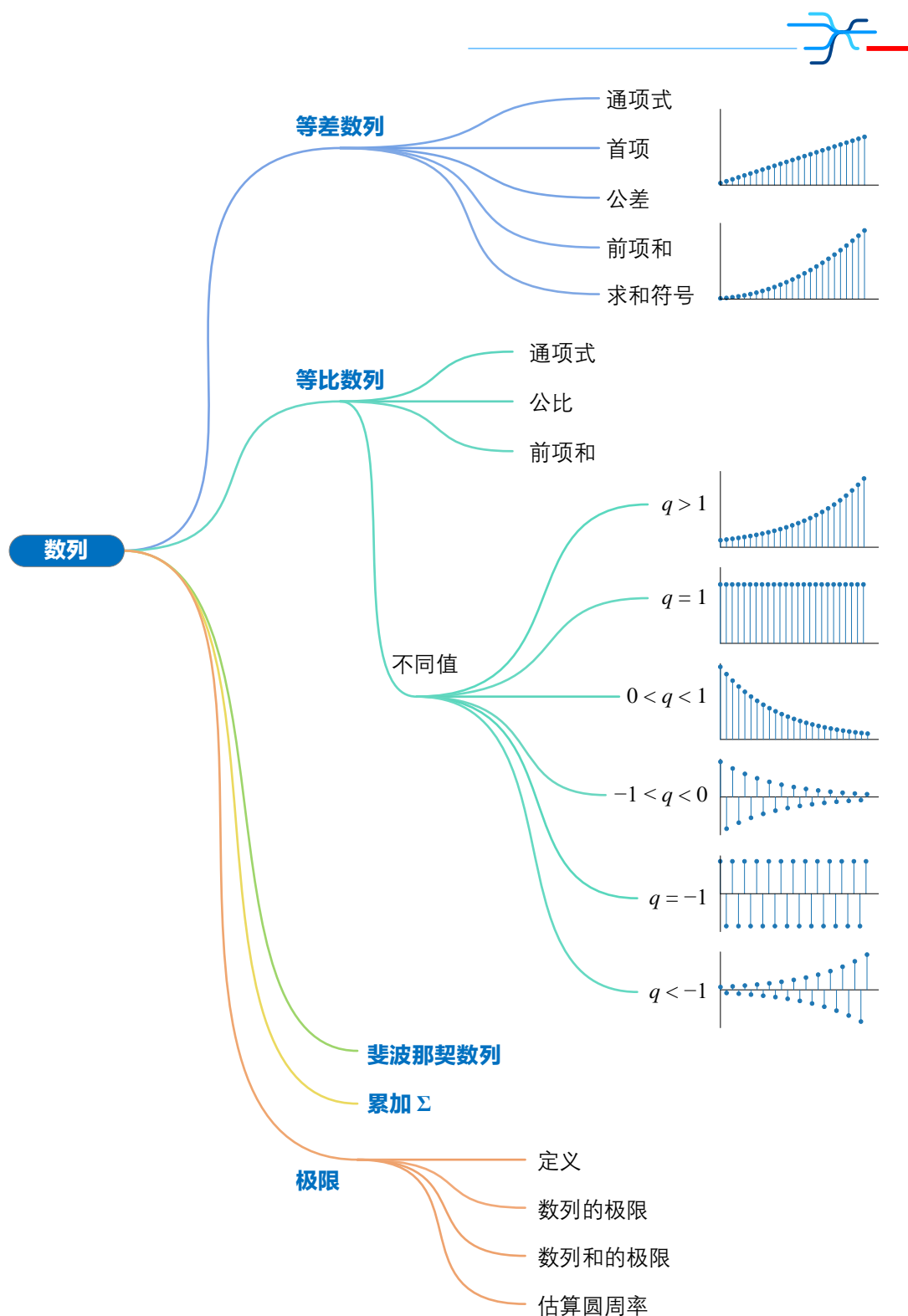
有数字的地方，就存在美。

***Wherever there is number, there is beauty.***

—— 普罗克洛 (Proclus) | 古希腊哲学家 | 412 ~ 485



- ◀ `numpy.sum()` 计算数列和
- ◀ `numpy.cumsum()` 计算累积和
- ◀ `numpy.cumprod()` 计算累积乘积
- ◀ `numpy.arange()` 根据指定的范围以及设定的步长，生成一个等差数列，数据类型为数组
- ◀ `matplotlib.pyplot.stem()` 绘制火柴梗图



本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

## 14.1 芝诺悖论：阿基里斯追不上乌龟

**芝诺悖论** (Zeno's paradoxes) 中最有名的例子莫过于“阿基里斯追乌龟”。

**阿基里斯** (Achilles) 是古希腊神话中的勇士，可谓飞毛腿。而乌龟的奔跑速度仅仅是阿基里斯的  $1/10$ 。赛跑比赛时，阿基里斯让乌龟在自己前面 100 米处起跑，他自己在后面追。

根据芝诺悖论，阿基里斯不可能追上乌龟。

芝诺的逻辑是这样的，赛跑过程中，阿基里斯必须先追到 100 米处，而此时乌龟已经向前爬行了 10 米。此时，相当于乌龟还是领先阿基里斯 10 米，这算是一个新的起跑点。

阿基里斯继续追乌龟，当他跑了 10 米之后，乌龟则又向前爬了 1 米。

于是，阿基里斯还需要再追上 1 米，于此同时乌龟又向前爬了  $1/10$  米。

如此往复，结论是阿基里斯永远也追不上乌龟。

为了方便可视化，假设乌龟爬行速度是阿基里斯奔跑速度的  $1/2$ 。设定，阿基里斯奔跑速度 10 m/s，神龟爬（飞）行速度 5 m/s。

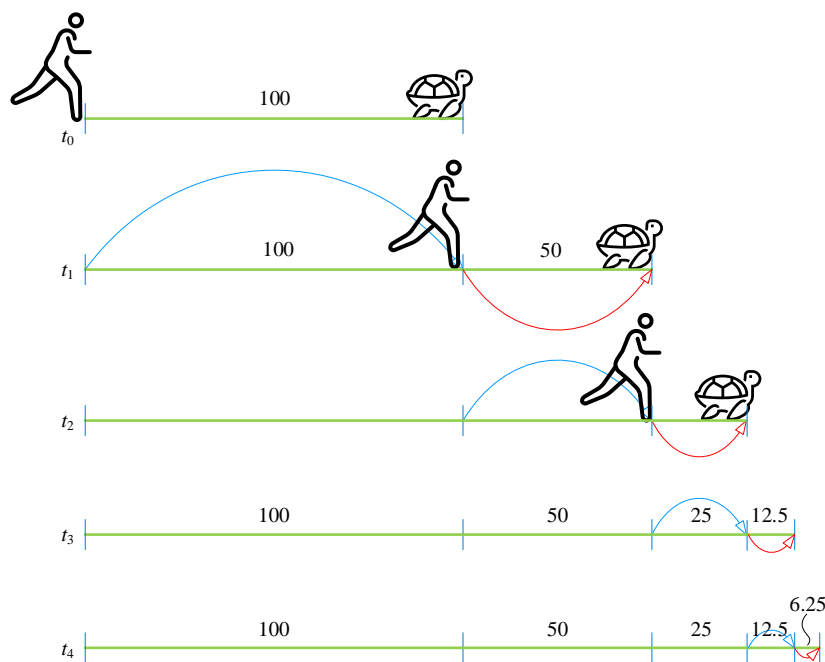


图 1. 阿基里斯追乌龟

$t_0 = 0$  s 时刻，乌龟在阿基里斯前方 100 米处，两者同时起跑。

$t_1 = 10$  s, 阿基里斯跑了 10 s, 追到 100 m; 而这段时间, 乌龟向前跑了 50 m。因此, 此刻乌龟领先优势为 50 m。

$t_2 = 10 + 5$  s, 阿基里斯又跑了 5 s, 又追了 50 m。5 s 时间, 乌龟跑了 25 m, 而此时乌龟领先优势为 25 m。

$t_3 = 10 + 5 + 2.5$  s, 阿基里斯又跑了 2.5 s, 再追了 25 m。此刻乌龟领先优势为 12.5 m。

$t_4 = 10 + 5 + 2.5 + 1.25$  s, 阿基里斯再追了 12.5 m, 此刻乌龟领先优势为 6.25 m。

时间无限可分, 距离无限可分, 上述过程无穷尽也, 似乎阿基里斯永远也追不上乌龟。

### 同向追赶问题

看到这里, 大家一定会有不同意见。

这分明就是一道小学算数的“同向追赶问题”, 距离之差 (100 m) 除以速度之差 (5 m/s) 就等于阿基里斯追上乌龟所需要的时间为 20 s。而 20 s 时间, 阿基里斯一共跑了 200 m。

这种解题思路固然正确。但是, 解题过程的前提条件是, 假设阿基里斯恰好追上了乌龟!

解题技巧当然重要。实际上, 看似无比荒诞的阿基里斯追乌龟问题, 其中蕴含的数学思想才是内核。

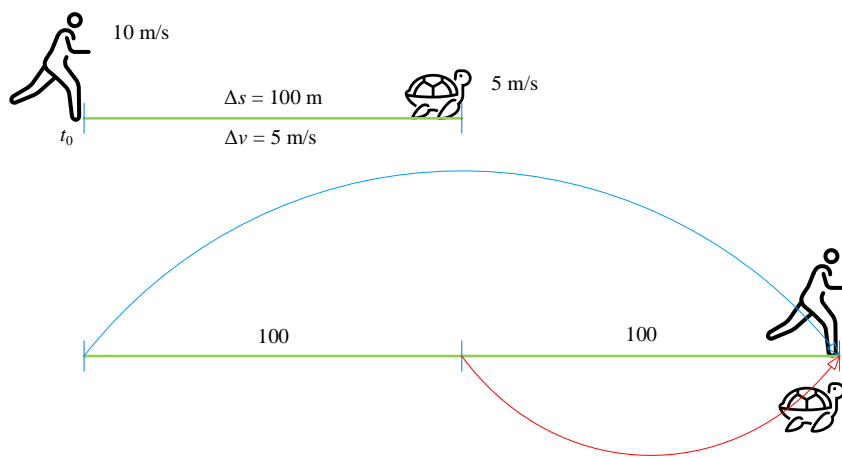


图 2. 小学数学同向追赶问题

### 一尺之棰，日取其半，万世不竭

下面用数列这个数学工具来分析上述问题。**数列** (sequence) 是指按照一定规则排列的一列数。

将图 1 中每段时间间隔写成一个数列：

$$10, 5, 2.5, 1.25, 0.625, 0.3125, 0.15625, 0.078125, \dots \quad (1)$$

图 3 (a) 用火柴梗图可视化 (1) 数列。

追赶时间的逐项和也写成一个数列累加：

$$10, 15, 17.5, 18.75, 19.375, 19.6875, 19.84375, 19.921875, \dots \quad (2)$$

图 3 (b) 所示火柴梗图为 (2) 数列。可以发现上述数列似乎逐渐趋向于 20，即阿基里斯追上乌龟所需要的时间。

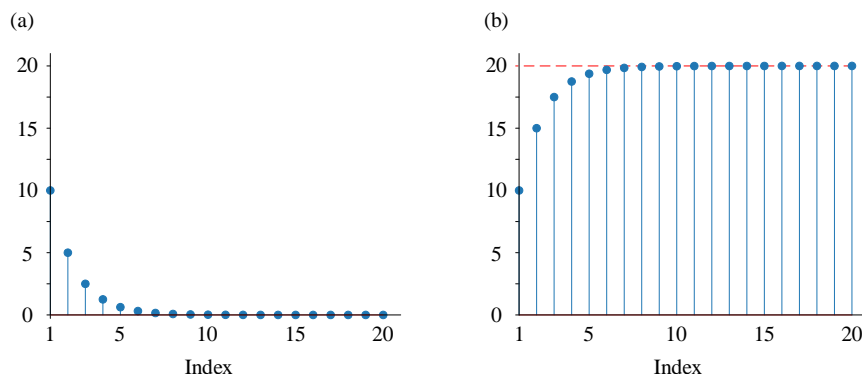


图 3. 时间间隔数列和时间逐项和数列

将阿基里斯在不同时刻之间奔跑的距离写成一列数：

$$100, 50, 25, 12.5, 6.25, 3.125, 1.5625, 0.78125, \dots \quad (3)$$

容易发现，这个数列就是大家熟悉的等比数列。上述数列的逐项和构成了一个新数列：

$$100, 150, 175, 187.5, 193.75, 196.875, 198.4375, 199.21875, \dots \quad (4)$$

可以发现上述数列似乎逐渐趋向于 200，即阿基里斯追上乌龟总共奔跑的距离。

这体现的正是庄子的哲学观点——“一尺之棰，日取其半，万世不竭。”如图 4 所示，面积为 1 的正方形，每次取一半，如此往复，没有尽头。

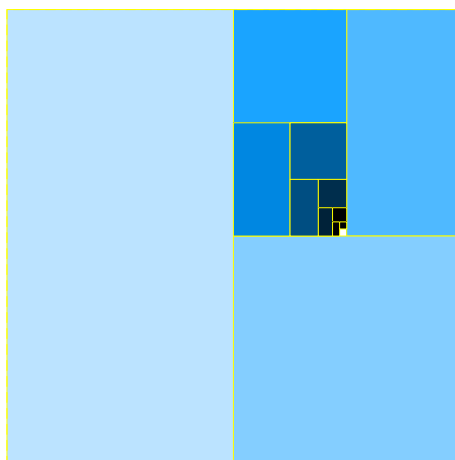


图 4. 日取其半，万世不竭

大家经常会遇到类似比较 1 和  $0.99999\dots$  大小之类的数学问题，其中蕴含的数学思想就是极限。本章就讲解数列、数列前  $n$  项和、极限等数学工具。

## 14.2 数列分类

几种常见的数列：

- ◀ **等差数列** (arithmetic sequence 或 arithmetic progression)，图 5 (a) 为递增等差数列，图 5 (b) 为递减等差数列；
- ◀ **等比数列** (geometric sequence 或 geometric progression)，图 5 (c) 为递增等比数列，图 5 (d) 为递减等比数列；
- ◀ **正负相间数列** (sign sequence 或 bipolar sequence)，如图 5 (e) 和 (f) 所示；
- ◀ **斐波那契数列** (Fibonacci sequence)，如图 5 (g) 所示；
- ◀ **随机数列** (random sequence)，如图 5 (h) 所示。

此外，根据数列项的数量，数列可以分为**有限项数列** (finite sequence) 和**无限项数列** (infinite sequence)。

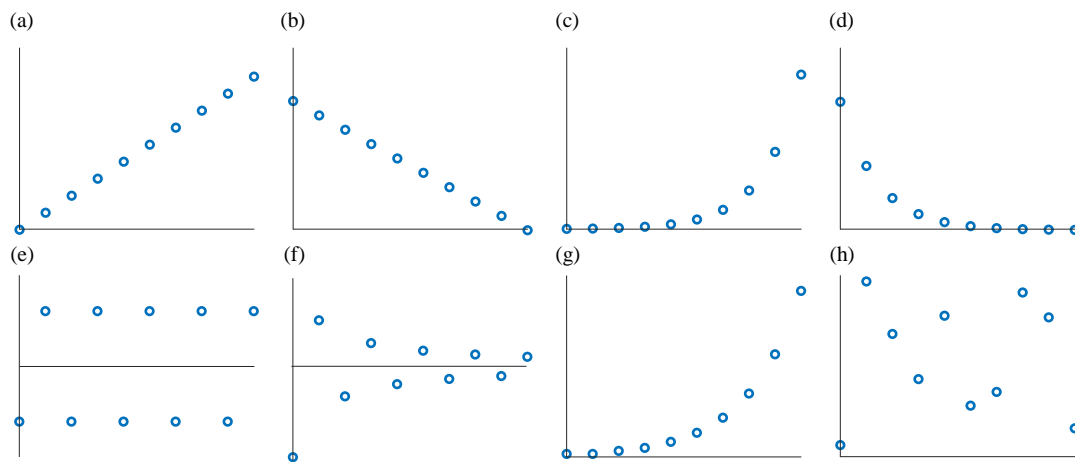


图 5. 几种数列

## 14.3 等差数列：相邻两项差相等

等差数列指的是数列中任何相邻两项的差相等，比如 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, ...

等差数列中相邻两项差值常被称作**公差** (common difference)。将数列的第  $k$  项用一个具体含有参数  $k$  式子表示出来，称作该数列的通项公式。

等差数列通项公式  $a_k$  的一般式如下：

$$a_k = a + (k-1) \cdot d \quad (5)$$

$a_1$  (读作 a sub one) 为数列第一项，即**首项** (initial term)  $a_1 = a$ ； $d$  为公差； $k$  为**项数** (number of terms)。`numpy.arange()` 和 `numpy.linspace()` 可以用来生成等差数列。

(5) 所示等差数列前  $k$  项之和为  $S_k$ ：

$$\begin{aligned} S_k &= a + (a+d) + (a+2d) + \dots + (a+(k-1) \cdot d) \\ &= \sum_{i=1}^k (a + (i-1) \cdot d) = a \cdot k + \frac{k(k-1)}{2} \cdot d \end{aligned} \quad (6)$$

上式中， $i$  为**索引** (index) 也叫序号； $\Sigma$  是求和符号，是希腊字母  $\sigma$  的大写，读作 sigma。`numpy.sum()` 可以用来计算数列和。

▲ 注意区分， $\Pi$  是求积符号，它是希腊字母  $\pi$  的大写。

**欧拉** (Leonhard Euler) 最先使用  $\Sigma$  来表达求和。

相信读者还记得，等差数列求和的计算方法——首项加末项之和，乘以项数，然后除 2。相传，这个等差数列求和方法是**高斯** (Johann Carl Friedrich Gauss) 年仅 10 岁的时候发现的。

本书 1 章介绍，给定一系列数，除了求和之外，还有**累计求和** (cumulative sum)。比如，等差数列 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 的累积和为 1, 3 (1+2), 6 (1+2+3), 10 (1+2+3+4), 15, 21, 28, 36, 45, 55。累积和的最后一项也是数列之和。`numpy.cumsum()` 可以用来计算数列累计求和。

下面，我们编写一段 Python 代码，计算等差数列 1, 2, 3, 4, 5, ..., 99, 100 之和，以及数列累积和。并绘制图 6 两图；图 6 (a) 为  $a_k$  随序数变化，图 6 (b) 为  $S_k$  和随序数变化。

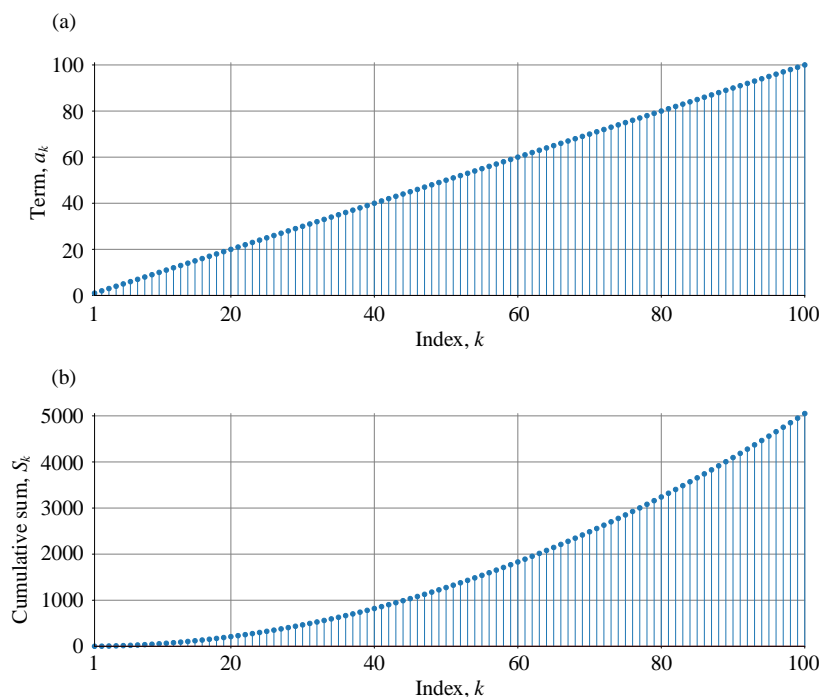


图 6. 等差数列 1,2,3,4,5,...,99,100 和数列累积和

## 函数视角

从函数角度，数列也是函数， $k$  为自变量， $a_k$  为因变量。需要特殊强调的是  $k$  的取值为正整数。如图 6 (a) 所示，(5) 可以看做特殊的一次函数。

也从函数角度来看，(6) 中  $k$  为自变量、取值同样为正整数， $S_k$  为因变量。如图 6 (b) 所示，(6) 可以看做特殊的二次函数。

数列作为一种特殊的函数，也具有各种函数性质。

$d > 0$ ，如图 7 (a) 所示数列  $a_k$  递增； $d < 0$ ，如图 7 (c) 所示数列  $a_k$  递减。

$d > 0$ ，如图 7 (b) 所示  $S_k$  图像开口向上，呈现出凸性； $d < 0$ ，数列递减，如图 7 (d) 所示  $S_k$  图像开口向下，呈现出凹性。



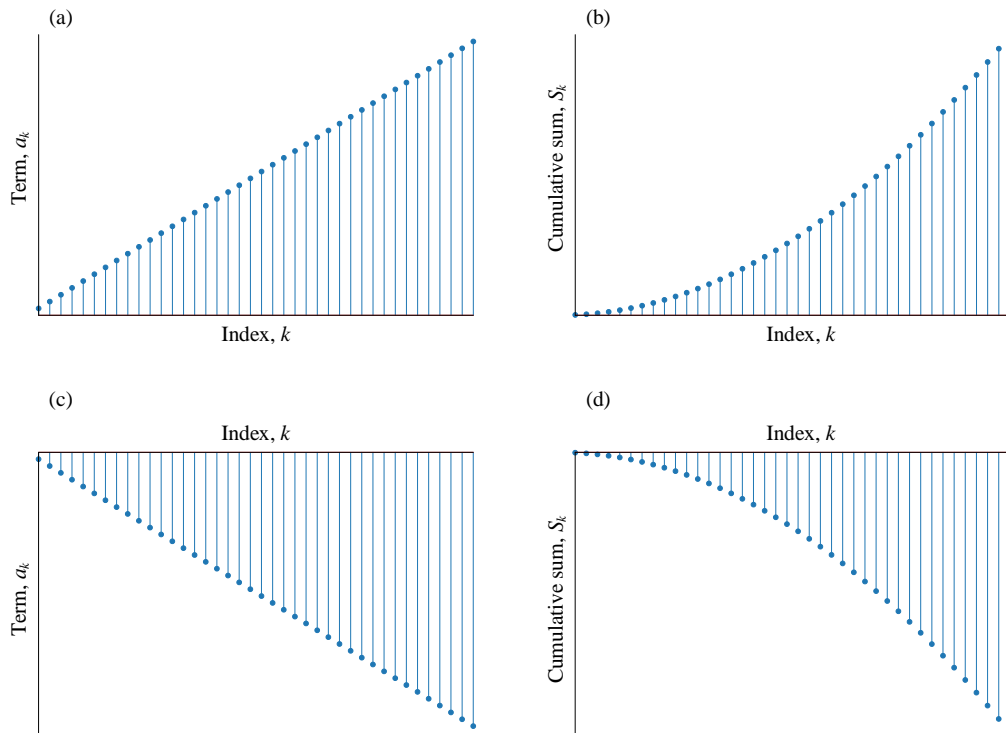


图 7. 公差为正、负两种情况

表 1. 数列英文表达

数学表达	英文表达
$a_n + a_{n-1} + \cdots + a_1 + a_0$	$a$ sub $n$ plus $a$ sub $n$ minus one plus dot dot dot plus $a$ sub one plus $a$ sub zero. $a$ sub $n$ plus $a$ sub $n$ minus one plus ellipsis plus $a$ sub one plus $a$ sub zero.
$a_n \cdot a_{n-1} \cdots a_1 \cdot a_0$	$a$ sub $n$ times $a$ sub $n$ times one plus dot dot dot times $a$ sub one times $a$ sub zero.
$a_0 + x(a_1 + x(a_2 + \cdots))$	$a$ sub zero plus $x$ times quantity of $a$ sub one plus $x$ times quantity of $a$ sub two plus dot dot dot
$(a_n - a_{n-1})^2$	$a$ sub $n$ minus $a$ sub quantity $n$ minus one all squared.



Bk3\_Ch14\_01.py 计算并绘制图 6。

## 14.4 等比数列：相邻两项比值相等

等比数列指的是数列中任何相邻两项比值相等，比如 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, ...

等比数列的比值被称作为**公比** (common ratio)。等比数列第  $k$  项  $a_k$  的一般式如下：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

$$a_k = aq^{k-1} = \frac{a}{q} q^k \quad (7)$$

其中， $a$  为首项， $q$  为公比。

▲ 注意  $q$  不为 0。

从函数角度，(7) 为特殊的指数函数—— $q$  为底数，自变量  $k$  为指数， $k$  的取值范围为正整数。

(7) 所示等比数列前  $k$  项之和  $S_k$  为：

$$\begin{aligned} S_k &= a + aq + aq^2 + aq^3 + \cdots + aq^{k-1} \\ &= \sum_{i=0}^{k-1} a \cdot q^i = \frac{a(q^k - 1)}{(q - 1)} = \frac{a}{q - 1} q^k - \frac{a}{q - 1} \end{aligned} \quad (8)$$

▲ 注意，上式中  $q$  不为 1。从函数角度，(7) 也是指数函数。

请大家回忆等比数列求和技巧。首先，计算  $S_k$  和  $q$  乘积：

$$S_k q = aq + aq^2 + aq^3 + \cdots + aq^{k-1} + aq^k \quad (9)$$

(9) 和 (8) 等式左右分别相减，并整理得到  $S_k$ ：

$$\begin{aligned} S_k q - S_k &= S_k (q - 1) = aq^k - a = a(q^k - 1) \\ \Rightarrow S_k &= \frac{a(q^k - 1)}{(q - 1)} \end{aligned} \quad (10)$$

## 函数视角

图 8 展示六种等比  $q$  取不同值时，等比数列的特点。

当  $q > 1$  时，等比数列呈现出**指数增长** (exponential growth)，如图 8 (a) 所示。

当  $q = 1$  时，等比数列退化成常数数列，如图 8 (b) 所示。

当  $0 < q < 1$  时，等比数列呈现出**衰退** (decay)，如图 8 (c) 所示。

当  $-1 < q < 0$  时，等比数列呈现两种特性：**振荡** (oscillate) 和**收敛** (converge)，如图 8 (d) 所示。

当  $q = -1$  时，等比数列只是反复振荡，也就是正负相间数列，如图 8 (e) 所示。

当  $q < -1$  时，等比数列振荡**发散** (diverge)，如图 8 (e) 所示。

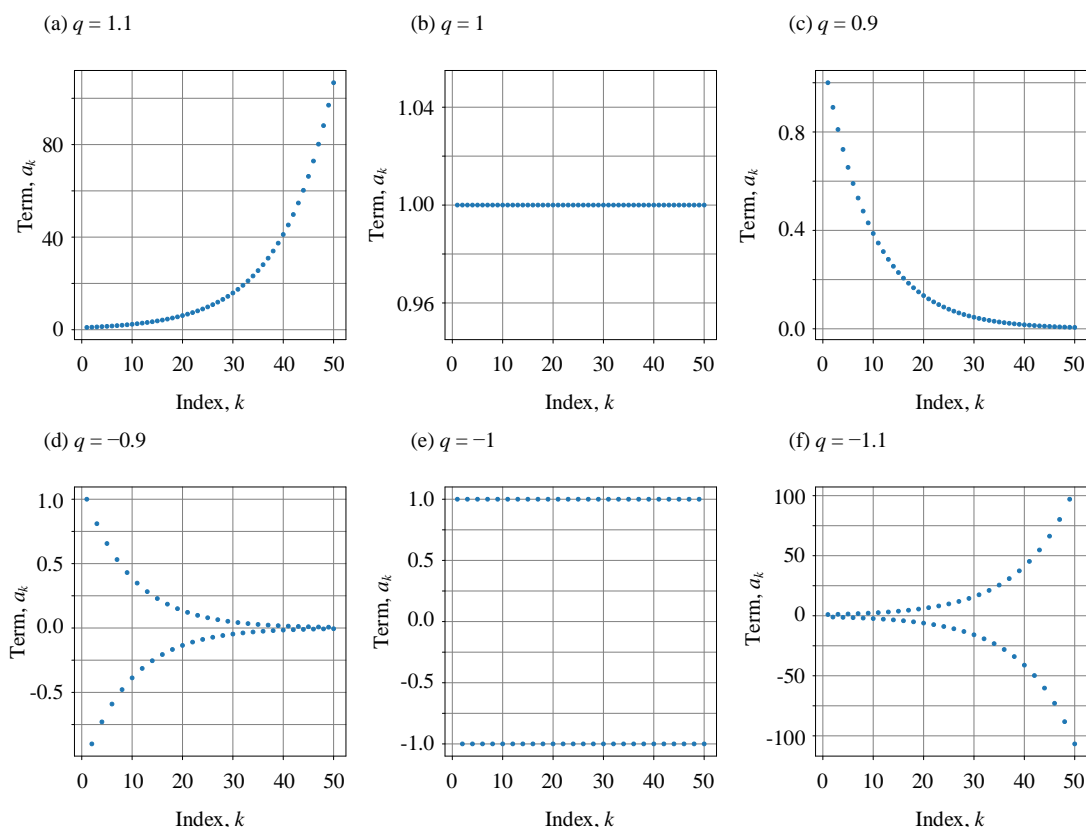


图 8. 六种等比数列趋势



Bk3\_Ch14\_02.py 绘制图 8 几幅子图。



在 Bk3\_Ch14\_02.py 基础上, 我们做了一个 App 用来交互呈现  $q$  对数列的影响。并采用 Plotly 呈现交互散点图像。请参考 Streamlit\_Bk3\_Ch14\_02.py。



数列在大数据和机器学习中有着广泛应用, 下面举一个例子介绍等比数列在**指数加权移动平均**(Exponentially Weighted Moving Average, EWMA) 方法的应用。

一般情况, 求解**平均值**(Simple Average, SA) 时, 对不同时间点的观察值赋予相同的权重, 比如下式:

$$SA = \frac{1}{n}(s_1 + s_2 + s_3 + \dots + s_n) \quad (11)$$

其中，所有观察值中  $s_1$  为最旧的数据， $s_n$  为最新数据。

采用 EWMA 可以保证越新的观察值享有越高的权重，这样估算得到的平均值能够反映数据近期趋势：

$$EWMA = \frac{(1-\lambda)}{1-\lambda^n}(\lambda^{n-1}s_1 + \lambda^{n-2}s_2 + \lambda^{n-3}s_3 + \dots + \lambda^0s_n) \quad (12)$$

(12) 中的  $\lambda$  为 **衰减系数** (decay factor)，取值范围在  $0 \sim 1$  之间。 $\lambda$  越小，衰减越明显。

可以发现索引为  $i$  的权重  $w_i$  计算式如下所示：

$$w_i = \frac{(1-\lambda)}{1-\lambda^n} \lambda^{n-i} \quad (13)$$

索引连续变化时，权重  $w_i$  便构成一个等比数列。图 9 所示为 EWMA 权重随衰减系数变化情况。

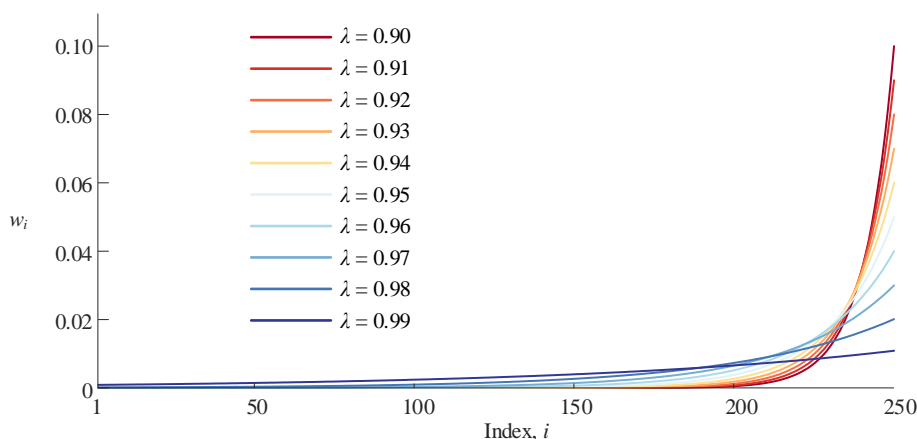


图 9. EWMA 权重随衰减系数变化

EWMA 权重一个重要的性质是，所有权重之和为 1，也就是，

$$\sum_{i=1}^n w_i = \frac{(1-\lambda)}{1-\lambda^n}(\lambda^{n-1} + \lambda^{n-2} + \lambda^{n-3} + \dots + \lambda^0) = 1 \quad (14)$$

更多有关时间序列、移动平均 MA、EWMA 方法及其应用，请读者阅读本系列丛书《数据科学》一册。

## 14.5 斐波那契数列

本书第 4 章介绍过斐波那契数列和杨辉三角的关系。**斐波那契数列** (Fibonacci sequence)，又被称作黄金分割数列。

斐波那契数列可以通过如下**递归** (recursion) 方法获得：

$$\begin{cases} F_0 = 0 \\ F_1 = F_2 = 1 \\ F_n = F_{n-1} + F_{n-2}, \quad n > 2 \end{cases} \quad (15)$$

于是，包括第 0 项，斐波那契数列的前 10 项为：

$$0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55 \quad (16)$$



Bk3\_Ch14\_03.py 产生并打印斐波那契数列。

### 黄金分割

斐波那契数列和**黄金分割** (golden ratio) 有着密切联系。图 10 所示为利用斐波那契数列构造的矩形，这个矩形是对黄金分割矩形的近似。黄金矩形的长宽比例  $\varphi$  为：

$$\varphi = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1.61803 \quad (17)$$

图 10 所示矩形的长宽比例为：

$$\frac{21+13}{21} \approx 1.61905 \quad (18)$$

图 10 所示的螺旋线叫做**斐波那契螺旋线** (Fibonacci spiral)，它是对**黄金螺旋线** (golden spiral) 的近似。



本系列丛书将在《矩阵力量》一本介绍如何用**特征值分解** (eigen decomposition) 求解斐波那契数列通项式。

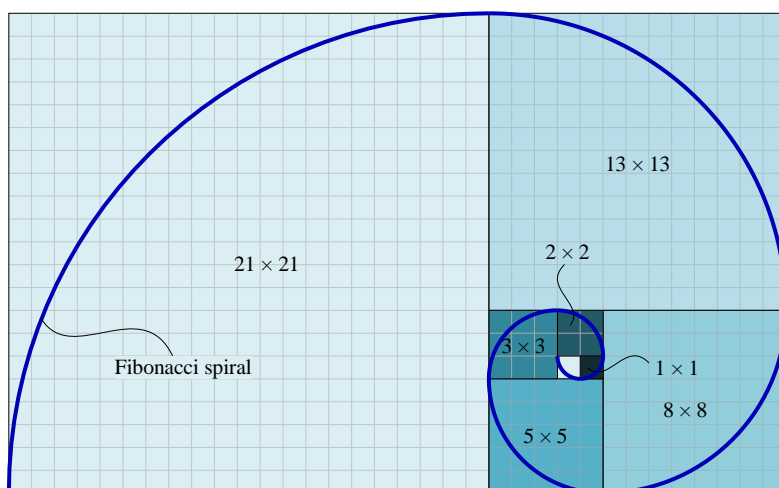


图 10. 斐波那契数列和黄金分割关系

## 14.6 累加：大写西格玛

**求和符号** (summation symbol) —— 大写西格玛  $\Sigma$  (capital sigma) —— 是表达求和的便捷记法。

以下式为例， $a_i$  描述求和中的每一项，下角标  $i$  代表**索引** (index variable 或 index)，也叫序号：

$$\sum_{i=1}^n a_i = a_1 + a_2 + \cdots + a_{n-1} + a_n \quad (19)$$

$\Sigma$  下侧和上侧的数字分别代表了**求和索引下限** (lower bound of summation) 和**求和索引上限** (upper bound of summation)，如图 11 所示。

图 11. 大西格玛求和记号

常用表达索引的字母有  $i$ 、 $j$ 、 $k$ 、 $m$ 、 $n$  等，采用什么索引字母并不影响求和结果，比如：

$$\sum_{i=1}^{100} a_i = \sum_{j=1}^{100} a_j = \sum_{k=1}^{100} a_k \quad (20)$$

$\Sigma$  中索引上下限可以都是具体正整数，比如：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

$$\sum_{i=1}^5 a_i = a_1 + a_2 + a_3 + a_4 + a_5 \quad (21)$$

$\Sigma$  中索引上下限也可以都是代数符号，比如：

$$\sum_{i=m}^n a_i = a_m + a_{m+1} + \cdots + a_{n-1} + a_n \quad (22)$$

$\Sigma$  的索引也可以是满足集合运算的标签：

$$\sum_{i \in S} a_i \quad (23)$$

## 降维

如图 12 所示，当索引  $i$  在一定范围变化时，比如  $1 \sim n$ ，数列  $\{a_i\}$  ( $i = 1 \sim n$ ) 本身相当于一个数组，而索引  $i$  像是方向。

对  $\{a_i\}$  ( $i = 1 \sim n$ ) 求和，相当于在  $i$  方向上将数组“压扁”，得到一个标量  $\sum_i a_i$ 。 $\sum_i a_i$  除以  $n$  (也就是数列元素个数)，便得到平均数。

从空间角度来看，数列  $\{a_i\}$  是一维数组，索引  $i$  就是它的维度。而求和运算  $\sum_i a_i$  相当于“降维”，得到的“和”只是一个数值，没有维度。

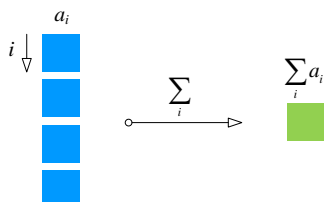


图 12. 从数组角度看求和

## 线性代数运算

看到这里，大家是否想得到，此处图 12 数列  $\{a_i\}$  相当于一个列向量  $\mathbf{a}$ ，即：

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad (24)$$

本书第 2 章在讲解向量和矩阵时提到过，对列向量  $\mathbf{a}$  所有元素求和可以利用如下向量内积或矩阵运算得到，

$$\sum_{i=1}^n a_i = \mathbf{1} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{1} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} = \mathbf{a}^T \mathbf{1} = \mathbf{1}^T \mathbf{a} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad (25)$$

其中， $\mathbf{1}$  就是全 1 列向量，和  $\mathbf{a}$  等长。

这样，我们就把数列求和、向量、向量内积、矩阵乘法这几个概念联系起来。

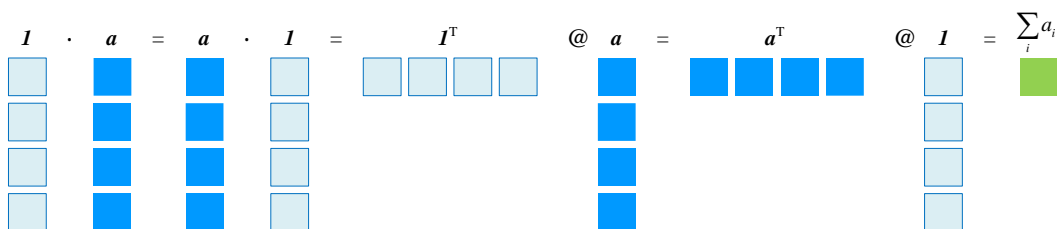


图 13. 从向量内积和矩阵乘法角度看求和

下面介绍几个有关求和符号的重要法则。

### 对数运算把连乘变连加

类似  $\Sigma$ ,  $\Pi$  (capital pi) 用来标记多项相乘，比如：

$$\prod_{i=1}^n a_i = a_1 a_2 \cdots a_{n-1} a_n \quad (26)$$

本书第 12 章提到，对数运算将连乘转化为连加，比如：

$$\ln \left( \prod_{i=1}^n a_i \right) = \ln a_1 + \ln a_2 + \cdots + \ln a_{n-1} + \ln a_n = \sum_{i=1}^n \ln a_i \quad (27)$$

### 乘系数

常数  $c$  乘  $a_i$ ，再求和  $\sum_{i=1}^n c a_i$ ，等同于常数  $c$  乘  $\sum_{i=1}^n a_i$ ：

$$\sum_{i=1}^n c a_i = c \left( \sum_{i=1}^n a_i \right) = c \sum_{i=1}^n a_i \quad (28)$$

其中， $c \times$  相当于“缩放”， $\sum$  相当于“降维”。如图 14 所示，(28) 相当于在说，“缩放  $\rightarrow$  降维”等价于“降维  $\rightarrow$  缩放”。



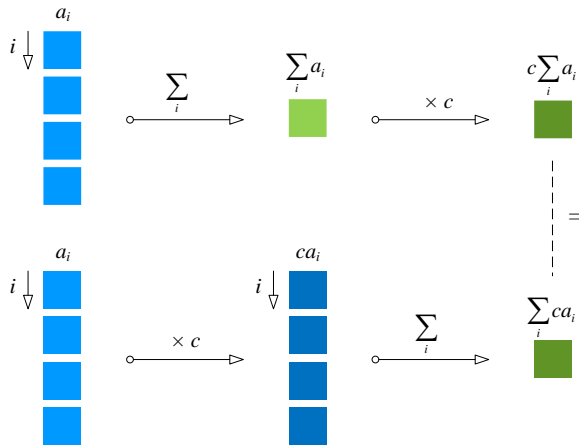


图 14. 乘系数

特别地，如果  $\Sigma$  内为一常数  $a$ ，则，

$$\sum_{i=1}^n a = na$$

(29)

分段求和

可以根据索引排列，将求和分割成几个部分分别求和，比如：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n a_i &= (a_1 + a_2 + \cdots + a_k) + (a_{k+1} + a_{k+2} + \cdots + a_n) \\ &= \sum_{i=1}^k a_i + \sum_{i=k+1}^n a_i \end{aligned}$$

(30)

分段求和常用在对齐不同长度数组，以便化简计算。

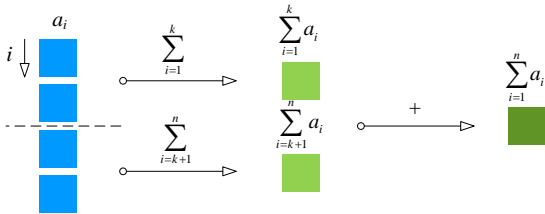


图 15. 分段求和

两项相加减

拥有相同索引的两项相加再求和，等于分别求和再相加，即，

$$\sum_{i=1}^n (a_i + b_i) = \sum_{i=1}^n a_i + \sum_{i=1}^n b_i \quad (31)$$

上述法则也适用于减法，即，

$$\sum_{i=1}^n (a_i - b_i) = \sum_{i=1}^n a_i - \sum_{i=1}^n b_i \quad (32)$$

## 平方

$\Sigma$  内为  $a_i$  的平方，则，

$$\sum_{i=1}^n (a_i^2) = \sum_{i=1}^n a_i^2 = a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + \cdots a_n^2 \quad (33)$$

如图 16 所示，利用前文 (24) 定义的列向量  $\mathbf{a}$ ，(33) 等价于：

$$\sum_{i=1}^n a_i^2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{a} \quad (34)$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}^T @ \mathbf{a} = \sum_{i=1}^n a_i^2$$

图 16. 从向量内积和矩阵乘法角度看  $\sum_{i=1}^n a_i^2$

$\sum_{i=1}^n a_i$  的平方则为：

$$\left( \sum_{i=1}^n a_i \right)^2 = (a_1 + a_2 + a_3 + \cdots a_n)^2 \quad (35)$$

显然，(33) 和 (35) 不相同：

$$\sum_{i=1}^n (a_i^2) \neq \left( \sum_{i=1}^n a_i \right)^2 \quad (36)$$

## 乘法

拥有相同索引的  $a_i$  和  $b_i$  相乘，再求和：

$$\sum_{i=1}^n (a_i b_i) = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + \cdots a_n b_n \quad (37)$$

定义列向量  $\mathbf{b}$ ， $\mathbf{b}$  和  $\mathbf{a}$  形状相同， $\mathbf{b}$  的元素为  $b_i$ 。如图 17 所示， $\sum_{i=1}^n (a_i b_i)$  等价于：

$$\sum_{i=1}^n (a_i b_i) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{b} = \mathbf{b}^T \mathbf{a} \quad (38)$$

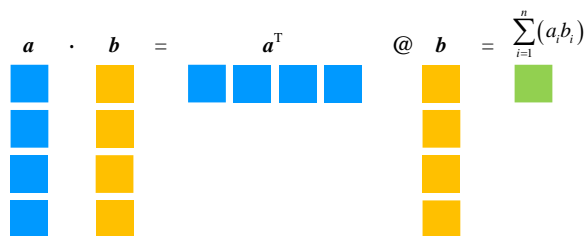


图 17. 从向量内积和矩阵乘法角度看  $\sum_{i=1}^n (a_i b_i)$

$\sum_{i=1}^n a_i$  和  $\sum_{i=1}^n b_i$  相乘展开得到：

$$\left( \sum_{i=1}^n a_i \right) \left( \sum_{i=1}^n b_i \right) = \sum_{i=1}^n a_i \sum_{i=1}^n b_i = (a_1 + a_2 + \cdots a_n)(b_1 + b_2 + \cdots b_n) \quad (39)$$

显然，(37) 和 (39) 不相同：

$$\sum_{i=1}^n (a_i b_i) \neq \left( \sum_{i=1}^n a_i \right) \left( \sum_{i=1}^n b_i \right) \quad (40)$$

## 二重求和

一些情况，我们需要用到二重求和记号  $\Sigma\Sigma$ ，比如：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=2}^4 a_i b_j &= \sum_{i=1}^3 a_i b_2 + a_i b_3 + a_i b_4 \\ &= (a_1 b_2 + a_1 b_3 + a_1 b_4) + (a_2 b_2 + a_2 b_3 + a_2 b_4) + (a_3 b_2 + a_3 b_3 + a_3 b_4) \end{aligned} \quad (41)$$

▲ 注意，式中内层  $\Sigma$  索引为  $j$ ，外层  $\Sigma$  索引为  $i$ 。先对索引  $j$  求和，再对索引  $i$  求和。注意上式中，每个元素只有一个索引，相当于只有一个维度。

### 两个索引

实践中，经常遇到的情况是一项有两个、甚至更多索引，比如  $a_{ij}$  有两个索引  $i$  和  $j$ 。

根据本节前文分析思路，举个例子，索引  $i$  的取值范围为  $1 \sim n$ ，索引  $j$  的取值范围为  $1 \sim m$ ，数组  $a_{ij}$  相当于有  $i$  和  $j$  两个维度。

这是否让大家想到了本书第 1 章讲过的矩阵，如图 18 所示， $a_{ij}$  相当于是矩阵  $A$  的第  $i$  行、第  $j$  列元素。

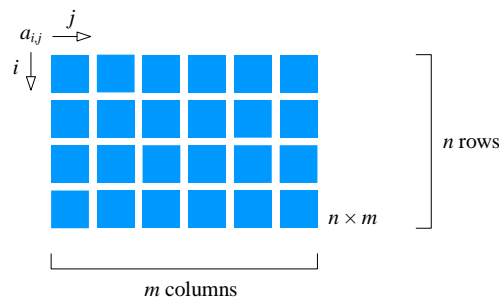


图 18.  $n \times m$  矩阵  $A$

本节后续内容就围绕图 19 热图给出的二维数组展开，这个数组有 8 行、12 列。

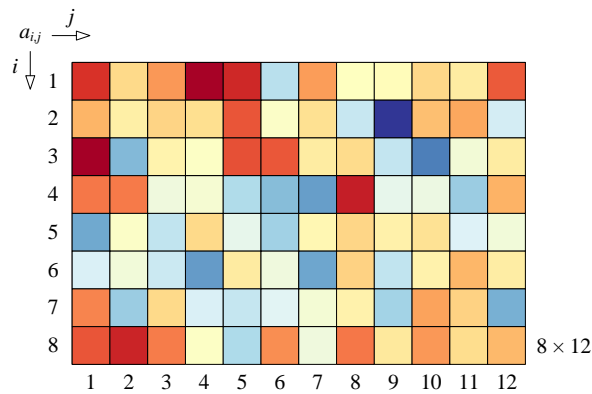


图 19.  $8 \times 12$  数组

### 偏求和

下面先介绍单维求和，也就是沿着一个索引求和。我们给它取个名字，叫“偏求和”。



这个“偏”字呼应本书第 16、18 章要介绍的“偏导数”、“偏微分”、“偏积分”等概念。

首先聊聊  $a_{i,j}$  对索引  $i$  偏求和：

$$\sum_{i=1}^n a_{i,j} \Rightarrow \sum_{i=1}^n a_{i,1}, \sum_{i=1}^n a_{i,2}, \dots, \sum_{i=1}^n a_{i,m} \quad (42)$$

Sum over  $i$

我们发现，得到的不是一个求和，而是  $m$  个和。也就是说，图 18 中每一列数值求和，每一列都有一个“偏求和”结果。

白话说， $a_{i,j}$  就是个“表格”， $\sum_i a_{i,j}$  就是按列求和，每列一个和。

如图 20 所示， $\sum_{i=1}^n a_{i,7}$  代表对数组第 7 列元素求和。

⚠ 注意，为了简化数学表达，我们也常用  $\sum_i a_{i,j}$  代表对索引  $i$  的求和，求和上下限不再给出。

$\sum_i a_{i,j}$  除以  $n$ ，得到的就是每一列元素的平均数。

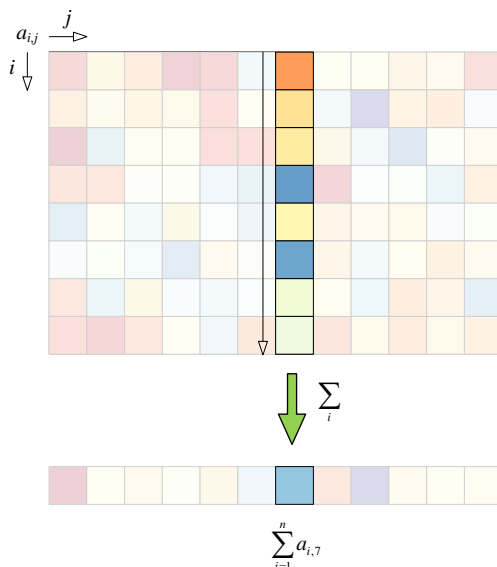


图 20. 将二维数组的第 7 列求和

这相当于矩阵  $a_{i,j}$  沿着索引  $i$  被“压扁”。如图 21 所示，原来数据有两个维度——索引  $i$  和  $j$ ；而现在只剩一个维度——索引  $j$ 。

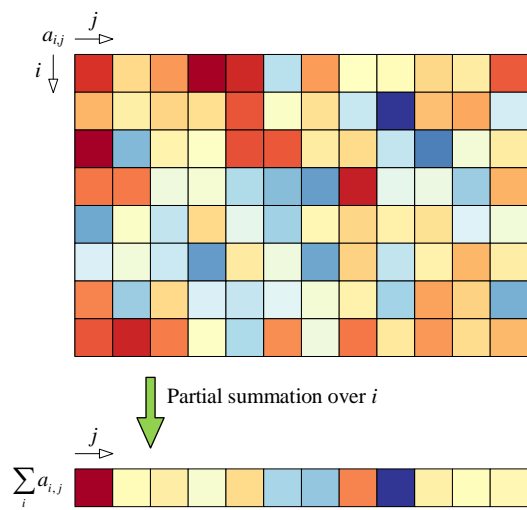


图 21. 将二维数组沿着索引  $i$  代表的方向“压扁”

同理，如图 22 所示， $a_{i,j}$  对索引  $j$  偏求和  $\sum_j a_{i,j}$ ，相当于沿着索引  $j$  方向将数组“压扁”； $\sum_j a_{i,j}$  只剩  $i$  这一个维度。

白话说， $a_{i,j}$  就是个“表格”， $\sum_j a_{i,j}$  就是按行求和，每行一个和。

$\sum_j a_{i,j}$  除以  $m$ ，得到的就是每一行元素的平均数。

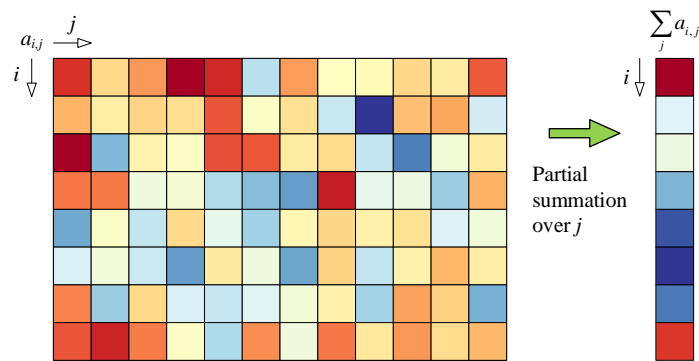


图 22. 将二维数组沿着索引  $j$  代表的方向“压扁”

多重求和

而  $\sum_i a_{i,j}$  和  $\sum_j a_{i,j}$  沿着各自剩余最后一个方向再次“压扁”，得到的就是  $a_{i,j}$  所有元素的和。

这种情况，求和顺序不影响结果，即：

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。  
版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。  
代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>  
本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>  
欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_{i,j} = \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n a_{i,j} \quad (43)$$

Sum over  $j$                       Sum over  $i$

上式也可以写作：

$$\sum_{j,i} a_{i,j} = \sum_{i,j} a_{i,j} \quad (44)$$

下标“ $j, i$ ”表示先对  $j$  求和、再对  $i$  求和；下标“ $i, j$ ”表示先对  $i$  求和、再对  $j$  求和。

图 23 所示为上述计算的过程分解。

⚠ 注意，只有数组是“方方正正”的结构时，上式才成立；否则，求和先后顺序会影响到结果。这一点和多重积分中积分先后顺序原理一致。

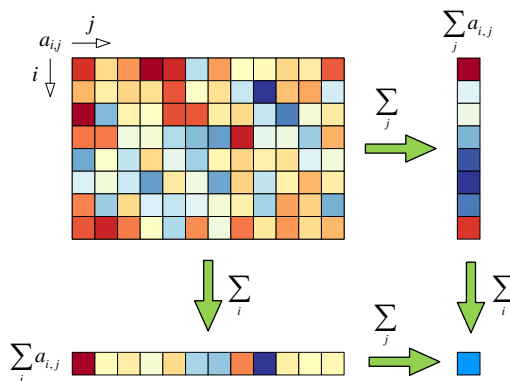


图 23. 求和顺序不影响结果

举个例子：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=2}^4 a_{i,j} &= \sum_{i=1}^3 a_{i,2} + a_{i,3} + a_{i,4} \\ &= (a_{1,2} + a_{1,3} + a_{1,4}) + (a_{2,2} + a_{2,3} + a_{2,4}) + (a_{3,2} + a_{3,3} + a_{3,4}) \end{aligned} \quad (45)$$

调换求和顺序，得到：

$$\begin{aligned} \sum_{j=2}^4 \sum_{i=1}^3 a_{i,j} &= \sum_{j=2}^4 a_{1,j} + a_{2,j} + a_{3,j} \\ &= (a_{1,2} + a_{2,2} + a_{3,2}) + (a_{1,3} + a_{2,3} + a_{3,3}) + (a_{1,4} + a_{2,4} + a_{3,4}) \end{aligned} \quad (46)$$

可以发现 (45) 和 (46) 两式相等。

## 矩阵运算视角

前文介绍的“偏求和”和多重求和都可以通过矩阵运算得到结果。

如图 24 所示， $a_{ij}$  对索引  $i$  偏求和等价于如下矩阵运算：

$$\mathbf{I}^T \mathbf{A} = \sum_i a_{i,j} \quad (47)$$

⚠ 注意，(47) 中全 1 列向量  $\mathbf{I}$  的形状为  $8 \times 1$ ，转置得到  $\mathbf{I}^T$  的形状为  $1 \times 8$ 。

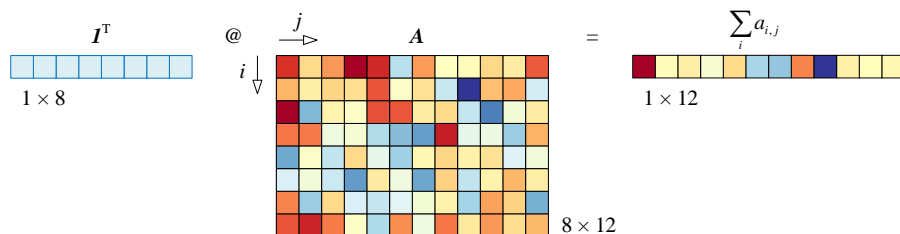


图 24. 计算矩阵  $\mathbf{A}$  每列元素和

如图 24 所示， $a_{i,j}$  对索引  $j$  偏求和等价于如下矩阵运算：

$$\mathbf{A} \mathbf{I} = \sum_j a_{i,j} \quad (48)$$

⚠ 注意，(48) 中全 1 列向量  $\mathbf{I}$  的形状为  $12 \times 1$ 。

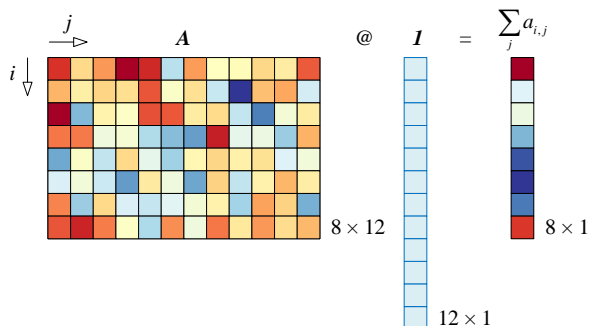


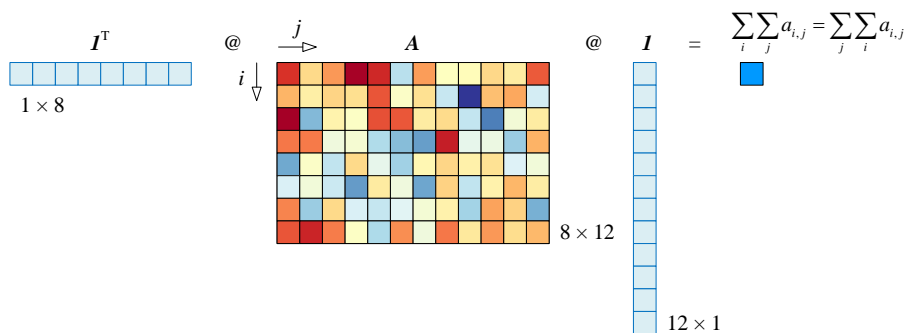
图 25. 计算矩阵  $\mathbf{A}$  每行元素和

如图 26 所示，求矩阵  $\mathbf{A}$  所有元素之和对应的矩阵运算为：

$$\sum_i \sum_j a_{i,j} = \sum_j \sum_i a_{i,j} = \mathbf{I}^T \mathbf{A} \mathbf{I} \quad (49)$$

⚠ 再次强调，(49) 中两个全  $\mathbf{I}$  向量形状不同。



图 26. 计算二维矩阵  $A$  所有元素之和

## 两个以上索引

某一项可能有超过两个索引，比如  $a_{i,j,k}$  有三个索引，数组  $\{a_{i,j,k}\}$  相当于有三个维度。

图 27 所示为三维数组的多重求和运算，求和的顺序为“ $j, k, i$ ”。

首先， $a_{i,j,k}$  沿  $j$  索引求和，得到  $\sum_j a_{i,j,k}$ 。相当于一个立方体“压扁”为一个平面，三维降维到二维。

然后，再沿  $k$  索引求和，进一步将平面“压扁”得到一维数组。此时，数组只有一个索引  $i$ 。

最后，沿着  $i$  再求和，得到一个标量  $\sum_{j,k,i} a_{i,j,k}$ 。

请大家自行绘制按照“ $i, j, k$ ”这个顺序求和得到  $\sum_{i,j,k} a_{i,j,k}$  过程示意图。

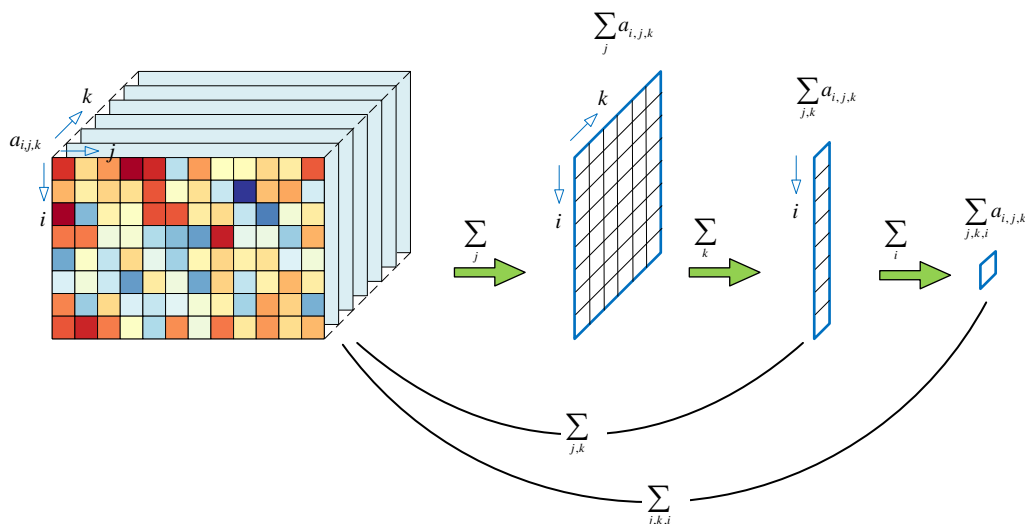


图 27. 三维数组的求和运算

对于多维数组，建议大家了解一下 Python 中 xarray 这个工具包。此外，Pandas 数据帧也是处理多维数组不错的工具。本系列丛书会介绍 xarray 和 Pandas 这两个工具。

爱因斯坦曾经提出过以自己名字命名的求和法则，叫做**爱因斯坦求和约定** (Einstein summation convention)。Numpy 中 numpy.einsum() 函数的运算规则就是基于爱因斯坦求和约定。

➔ 爱因斯坦求和约定简化多维数组求和运算，本系列丛书《矩阵力量》将展开介绍。

表 2. 求和和求积的英文表达

数学表达	英文表达
$\sum_{i=1}^n a_i$	The sum of all the terms (small) $a$ sub (small) $i$ , where $i$ takes the integers from one to (small) $n$ . The sum from (small) $i$ equals one to (small) $n$ , (small) $a$ sub $i$ . The sum as (small) $i$ runs from one to $n$ of (small) $a$ sub (small) $i$ .
$\sum_{n=1}^5 2n$	The sum of 2 times $n$ as $n$ goes from 1 to 5. The summation of the expression $2n$ for integer values of $n$ from 1 to 5.
$\prod_{i=1}^n a_i$	The multiplication of all the terms $a$ sub $i$ , where $i$ takes the values from one to $n$ . The product from $i$ equals 1 to $n$ of $a$ sub $i$ .
$\prod_{i=1}^{\infty} y_i$	The product from $i$ equals one to infinity of $y$ sub $i$ .



Bk3\_Ch14\_04.py 绘制本节二维数组热图，并计算“偏求和”。请大家自行计算这个二维数组所有元素之和。

## 14.7 数列极限：微积分的一块基石

### 数列极限

数列  $\{a_n\}$  极限存在的确切定义如下。

设  $\{a_n\}$  为一数列，如果存在常数  $C$ ，对于任意给定的正数  $\varepsilon$ ，不管  $\varepsilon$  有多小，总存在正整数  $N$ ，使得  $n > N$  时，如下不等式均成立，

$$|a_n - C| < \varepsilon \tag{50}$$

那么就称常数  $C$  是数列  $\{a_n\}$  的极限；也可以说，数列  $\{a_n\}$  收敛于  $C$ ：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = C \tag{51}$$

其中， $\lim$  是英文 limit 的缩写， $n \rightarrow \infty$  表达  $n$  趋向无穷。

如果，极限  $C$  不存在，则称数列  $\{a_n\}$  极限不存在。

### 几个例子

给定如下等比数列：

$$a_n = \frac{1}{2^n} \quad (52)$$

当  $n$  趋向于无穷，数列值趋向于零：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2^n} = 0 \quad (53)$$

对于如下数列，当  $n$  趋向无穷时，数列值在两个定值之间震荡；因此，不存在极限：

$$a_n = (-1)^n \quad (54)$$

对于如下数列，当  $n$  趋向无穷时，数列值急速增加至无穷，即发散；因此，也不存在极限：

$$a_n = 2^n \quad (55)$$

收敛的数列，可以自下而上收敛、自上而下收敛、振荡收敛。

图 28 给出了三个收敛数列的例子。图 28 (c) 对应的数列如下：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n = e \quad (56)$$

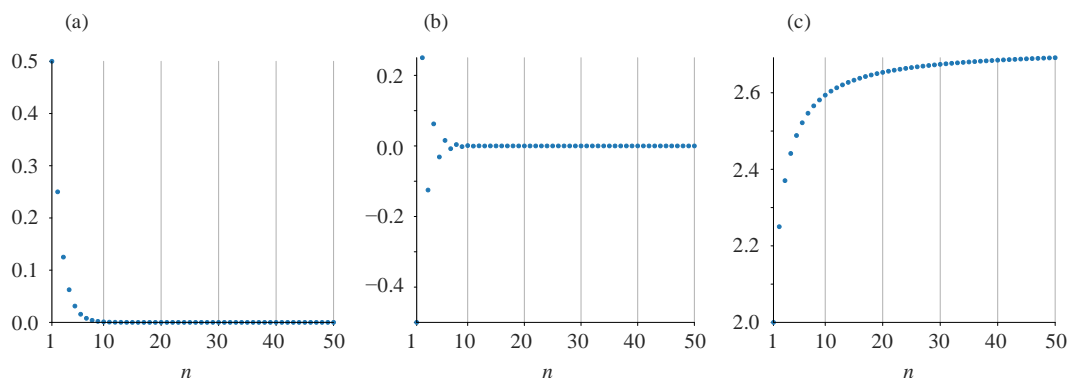


图 28. 收敛数列

### 数列和的极限

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

此外，数列之和也可以收敛。下式就是一个收敛的数列之和，数列之和随  $n$  变化趋势如图 29 (a) 所示：

$$1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \frac{1}{16} + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n} = 2 \quad (57)$$

如图 29 (b) 所示，以下数列之和也是收敛于 1：

$$\frac{1}{1 \times 2} + \frac{1}{2 \times 3} + \frac{1}{3 \times 4} + \frac{1}{4 \times 5} + \frac{1}{5 \times 6} + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(n+1)} = 1 \quad (58)$$

如图 29 (c) 所示，自然对数底数  $e$  也可以用数列和的极限来近似：

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} = 1 + \frac{1}{1} + \frac{1}{1 \times 2} + \frac{1}{1 \times 2 \times 3} + \frac{1}{1 \times 2 \times 3 \times 4} + \cdots = e \quad (59)$$

但是  $1/n$  这个数列之和并不收敛：

$$1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \frac{1}{5} + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \quad (60)$$

如果在以上数列中每一项增加正负号交替，这个数列之和收敛：

$$1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} = \ln(2) \quad (61)$$

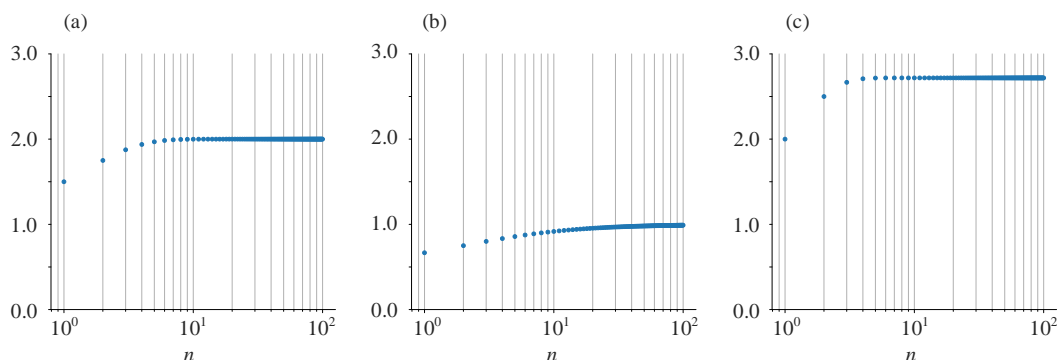


图 29. 数列之和收敛



Bk3\_Ch14\_05.py 绘制图 29。代码中利用 `sympy.limit_seq()` 函数计算极限值。

## 14.8 数列极限估算圆周率

本书第 3 章介绍，古代数学家通过割圆术不断提高圆周率的估算精度。随着数学方法的发展，很多数学家发现可以用数列和来逼近圆周率。这是圆周率估算的一次颠覆性进步。

比如莱布尼兹发现，如下数列之和逼近  $\pi/4$ ：

$$\frac{\pi}{4} \approx 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \dots + \frac{(-1)^{n+1}}{2n-1} \quad (62)$$

即

$$\pi = 4 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1}}{2k-1} \quad (63)$$

图 30 所示为上式随着  $k$  不断增加逼近圆周率值。

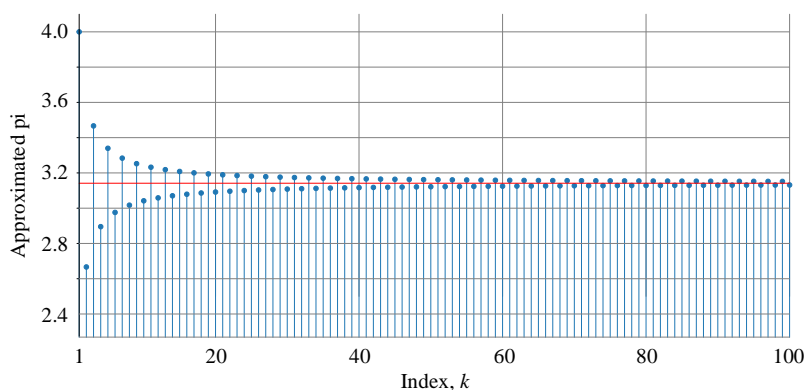


图 30. 数列之和逼近圆周率



Bk3\_Ch14\_06.py 绘制图 30。



本章介绍的大西格玛求和、极限这两个数学工具是微积分的基础。

大家在学习大西格玛求和时，请务必从几何、数据、维度、矩阵运算这几个视角分析求和运算；不然，复杂多层求和运算会让大家晕头转向。

此外，有了数列和极限这两个数学概念，我们在圆周率估算方法上又进一步。