

4

Discrete Random Variables

离散随机变量

取值为有限个或可数无穷个，对应概率质量函数 PMF



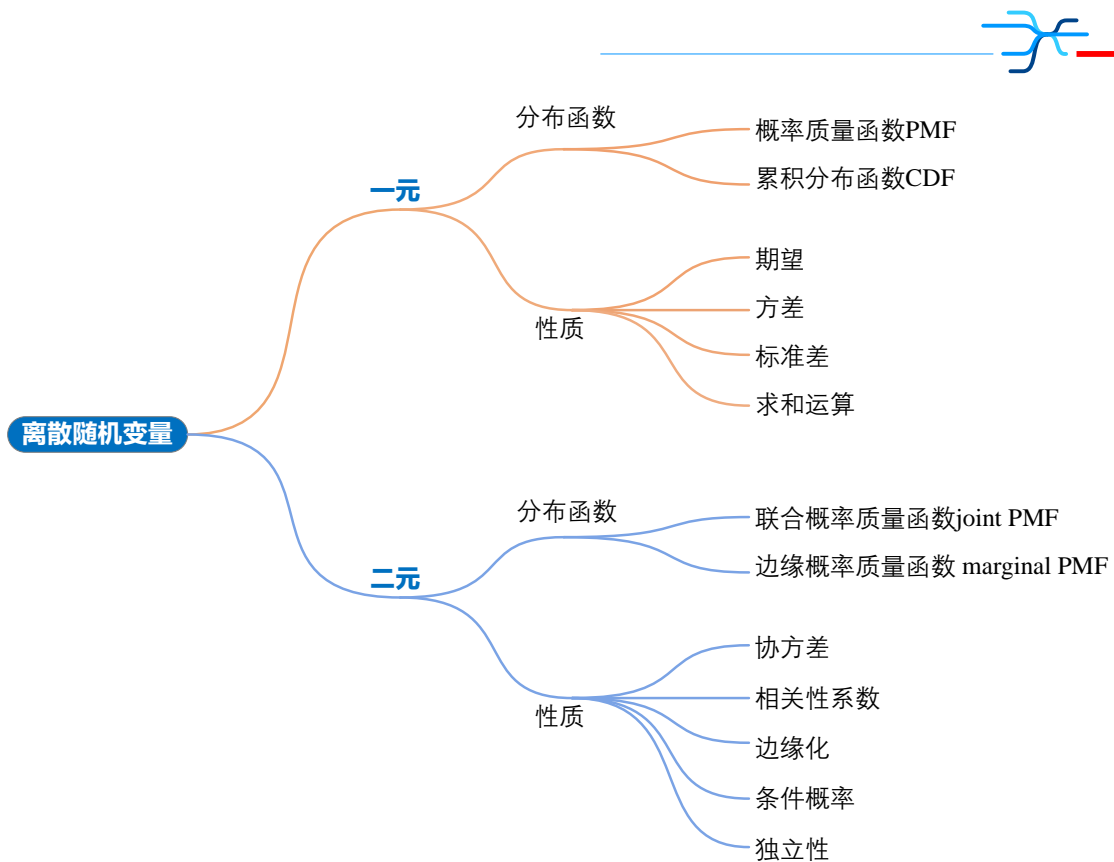
我，一个无数原子组成的宇宙，又是整个宇宙的一粒原子。

I, a universe of atoms, an atom in the universe.

—— 理查德·费曼 (Richard P. Feynman) | 美国理论物理学家 | 1918 ~ 1988



- ◀ `numpy.sort()` 排序
- ◀ `seaborn.heatmap()` 产生 heatmap
- ◀ `seaborn.histplot()` 绘制频数/概率/概率密度直方图
- ◀ `seaborn.scatterplot()` 绘制散点图



4.1 随机：天地不仁，以万物为刍狗

随机试验



《数学要素》第 20 章介绍过随机现象的确切定义。

在一定条件下，出现的可能结果不止一个，事前无法确切知道哪一个结果一定会出现，但大量重复试验中结果具有统计规律的现象称为随机现象。

随机试验 (random experiment) 是指在相同条件下对某个随机现象进行的大量重复观测。随机试验需要满足三个条件：

- a) 可重复，在相同条件下试验可以重复进行；
- b) 样本空间明确，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；
- c) 单次试验结果不确定，进行一次试验之前不能确定哪一个结果会出现，但必然出现样本空间中的一个。

两种随机变量：离散、连续

随机变量 (random variable) 是指在一次试验中可能出现不同取值的量，其取值由随机事件的结果决定。随机变量可以看做一个函数，它将样本数值赋给试验结果。换句话说，它是试验样本空间到实数集的函数。比如上一章为了方便表达“抛三枚色子试验”中三枚色子各自点数，我们定义了 X_1 、 X_2 、 X_3 ，它们都是随机变量。

随机变量分为两种——**离散** (discrete)、**连续** (continuous)。

如果随机变量的所有取值能够一一列举出来，可以是有限个或可数无穷个，这种随机变量被称作**离散随机变量** (discrete random variable)。

比如，投一枚硬币结果正面为 1、反面为 0。掷一枚色子得到的点数为 1、2、3、4、5、6 中的一个值。再比如，鸢尾花的标签有三种——setosa (C_1)、versicolour (C_2)、virginica (C_3)。上一章介绍的古典概率针对离散型随机变量。

与之相对的是，**连续随机变量** (continuous random variable)。连续随机变量取值可能对应全部实数，或者数轴上某一区间。比如，温度、人的身高体重都是连续随机变量。再比如，鸢尾花花萼长度、花萼宽度、花瓣长度、花瓣宽度也都可以视作连续随机变量。

字母

本书用大写斜体字母表达随机变量，比如 X 、 Y 、 Z 、 X_1 、 X_2 、 Y_1 、 Y_2 等。

用小写字母表达随机变量取值，比如 x 、 y 、 x_1 、 x_2 、 y_1 、 y_2 、 i 、 j 、 k 等。其中， x 、 y 、 x_1 、 x_2 、 y_1 、 y_2 等通用于离散、连续随机变量，而序号 i 、 j 、 k 一般用于离散随机变量。

简单来说， X 、 Y 、 Z 、 X_1 、 X_2 、 Y_1 、 Y_2 等替代描述随机试验结果的描述性文字。而 x 、 y 、 x_1 、 x_2 、 y_1 、 y_2 等相当于函数的输入变量，它们主要用在 **概率密度函数** (probability density function, PDF)、**概率质量函数** (probability mass function, PMF) 中。

如图 1 所示，抛一枚色子试验中，令随机变量 X 为色子点数， $X = x$ ， x 代表取值。也就是说， X 的取值为变量 x 。举个例子， $\Pr(X = x)$ 为事件 $\{X = x\}$ 的概率， x 表示随机变量 X 的取值。当然我们可以把数值直接赋值给随机变量，比如 $\Pr(X = 5)$ 。

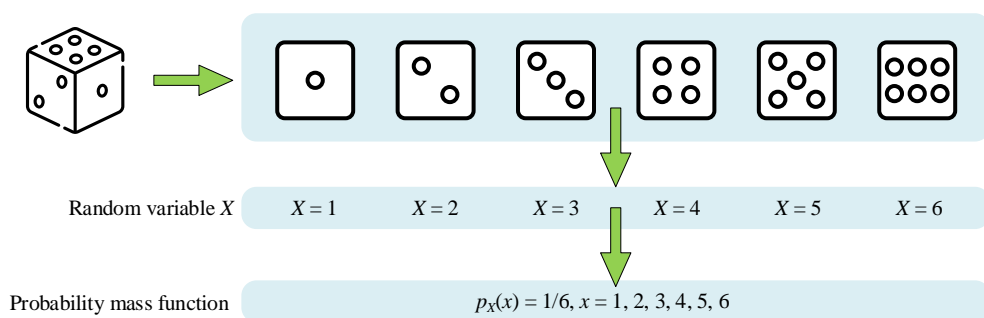


图 1. 随机试验、随机变量、概率质量函数三者关系

两种概率分布函数

研究随机变量取值的统计规律是概率论重要目的之一。概率分布函数是对统计规律的简化和抽象。图 2 比较两种概率分布函数——概率质量函数 PMF、概率密度函数 PDF。

白话来说，概率质量函数 PMF、概率密度函数 PDF 就是两种对样本空间概率为 1“切片、切块”、“切丝、切条”的不同方法。本章后续还会沿着这个思路继续讨论。

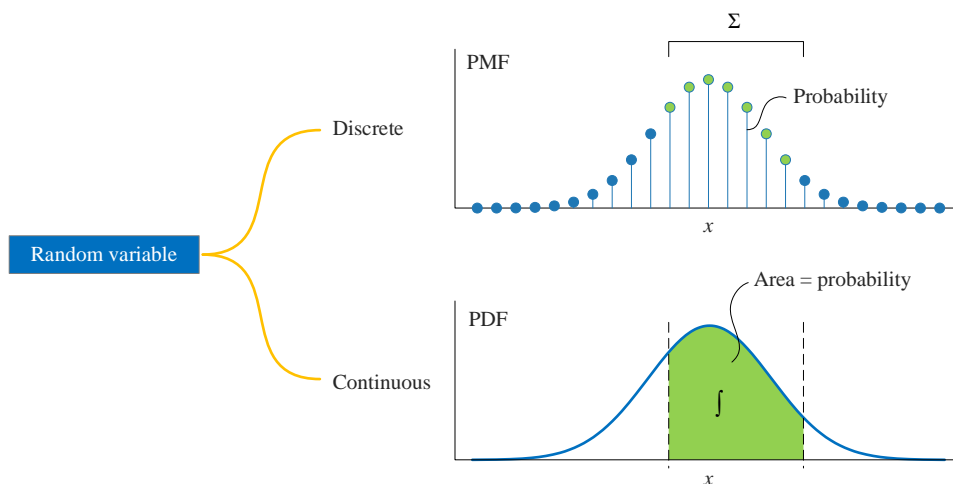


图 2. 比较概率质量函数、概率密度函数

概率质量函数 PMF

图 2 上图所示，**概率质量函数** (probability mass function, PMF) 是离散随机变量在特定取值上的概率。很多教材翻译把 PMF 翻译做“分布列”，本书则将其直译为概率质量函数。

概率质量函数本质上就是概率，因此本书很多时候也直接称之为概率。此外，本书大多时候将概率质量函数直接简写为 PMF。

本书用小字斜体字母 p 表达 PMF，比如随机变量 X 的概率质量函数记做 $p_X(x)$ 。下角标 x 代表描述随机试验的随机变量，概率质量函数的输入为变量 x 。而概率质量函数 $p_X(x)$ 的输出则为“概率值”。

和函数一样，概率质量函数的输入也可以不止一个。比如， $p_{X,Y}(x, y)$ 代表 (X, Y) 的联合概率质量函数。 $p_{X,Y}(x, y)$ 的输入为 (x, y) ，函数的输出为“概率值”。本章后文将专门以二元、三元概率质量函数为例讲解多元概率质量函数。

$p_X(x)$ 本身就是“概率值”，因此计算离散随机变量 X 取不同值时的概率，我们使用求和运算。因此， $p_X(x)$ 对应的数学运算符是 Σ 。

▲ 注意，有些资料为了方便，将 $p_X(x)$ 简写为 $p(x)$ ， $p_{X,Y}(x, y)$ 简做 $p(x, y)$ 。

抛一枚硬币

举一个例子，抛一枚硬币试验中，令 X_1 为正面朝上数量， X_1 的样本空间为 $\{0, 1\}$ 。 $X_1 = 1$ 代表硬币正面朝上， $X_1 = 0$ 代表硬币反面朝上。

随机变量 X_1 的 PMF 为：

$$p_{X_1}(x_1) = \begin{cases} 1/2 & x_1 = 0 \\ 1/2 & x_1 = 1 \end{cases} \quad (1)$$

相信读者已经对图 3 不陌生，我们在图像上增加标注，水平轴加 x_1 代表 PMF 输入，纵轴改为 PMF, $p_{X_1}(x_1)$ 代表概率质量函数。

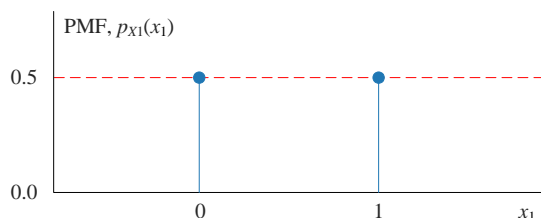


图 3. 随机变量 X_1 的 PMF

如果同时定义 X_2 为反面朝上的数量， X_2 的样本空间也是 $\{0, 1\}$ 。 $X_2 = 1$ 代表硬币反面朝上， $X_2 = 0$ 代表硬币反面朝下。

X_2 的 PMF 为：

$$p_{X_2}(x_2) = \begin{cases} 1/2 & x_2 = 0 \\ 1/2 & x_2 = 1 \end{cases} \quad (2)$$

显然，随机变量 X_1 和 X_2 的关系为 $X_1 + X_2 = 1$ ，具体如图 4 所示。显然 X_1 和 X_2 不独立，大家很快就会发现这种量化关系叫做负相关。

读到这里大家可能已经意识到，在概率质量函数中引入下角标 X_1 和 X_2 能帮助我们区分 $p_{X_1}(x_1)$ 、 $p_{X_2}(x_2)$ 这两个不同的 PMF。

⚠ 注意，本书中随机变量和变量形式上对应，比如 $p_{X_1}(x_1)$ 、 $p_{X_2}(x_2)$ 、 $p_X(x)$ 、 $p_Y(y)$ 。

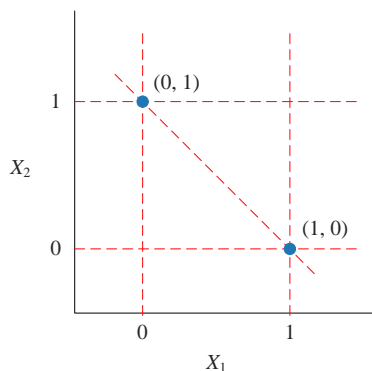


图 4. X_1 和 X_2 的量化关系

抛一个色子

再举一个例子，抛一枚色子试验，令离散随机变量 X 为色子点数。如图 5 所示， X 的 PMF 为：

$$p_X(x) = \begin{cases} 1/6 & x = 1, 2, 3, 4, 5, 6 \\ 0 & \text{Otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

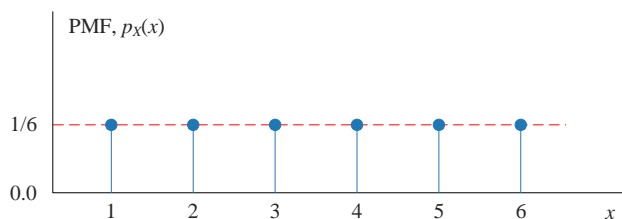


图 5. 离散随机变量 X 的 PMF

随机变量的函数

X 为一个随机变量，对 X 进行函数变换，可以得到其他的随机变量 Y ：

$$Y = h(X)$$

(4)

特别地，如果 $h()$ 为线性函数，从 X 到 Y 进行的是线性变换，比如：

$$Y = h(X) = aX + b$$

(5)

举个例子，本书前文在抛一枚硬币试验中，令随机变量 X_1 为获得正面的数量，即获得正面时结果为 1，反面结果为 0。

如果，设定一个随机变量 Y ，在硬币为正面时 $Y = 1$ ，但是反面时 $Y = -1$ 。那么 X_1 和 Y 的关系如下：

$$Y = 2X_1 - 1$$

(6)



本书第 14 章将专门介绍随机变量的线性变换。

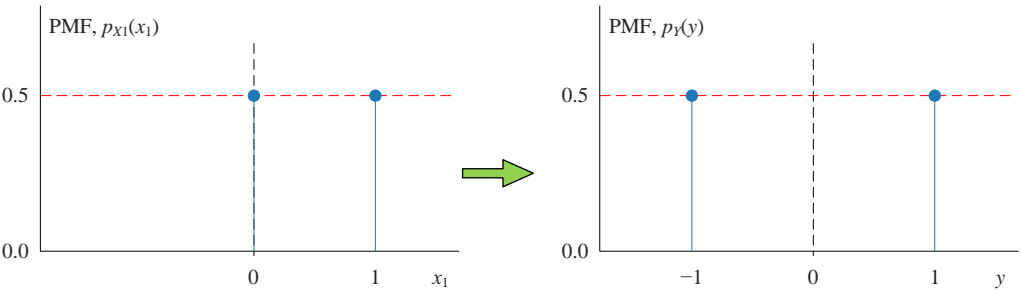


图 6. 随机变量 X_1 线性变换得到 Y 的过程

抛两个色子

上一章讲过一个例子，一次抛两个色子，第一个色子点数设为 X_1 ，第二枚色子的点数为 X_2 。 X_1 和 X_2 可以进行各种数学运算获得随机变量 Y 。

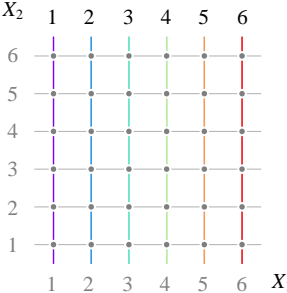
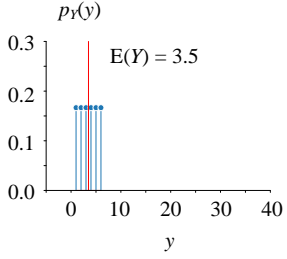
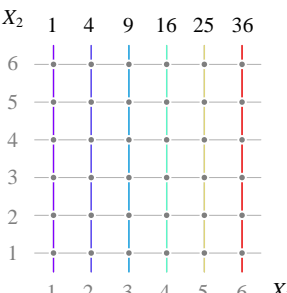
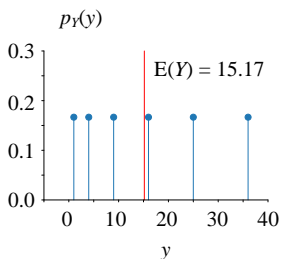
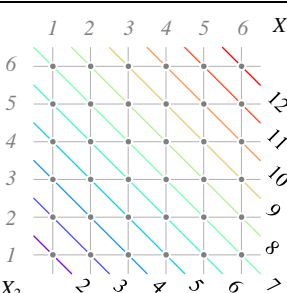
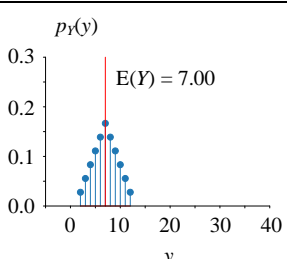
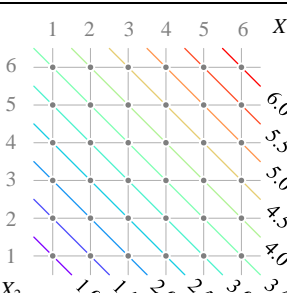
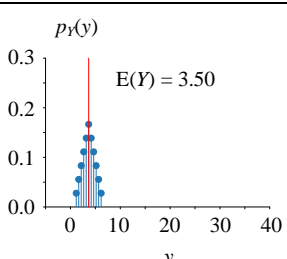
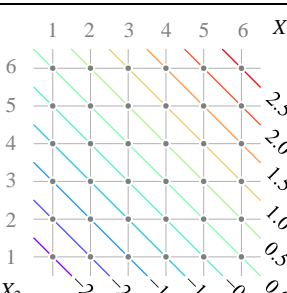
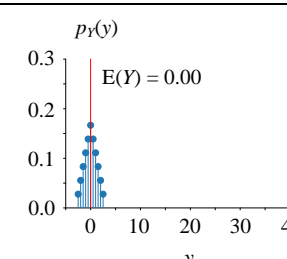
Y 本身有自己的样本空间，样本空间的每个样本都对应特定概率值。利用本章前文内容，我们可以把 $Y = y$ 的概率值写成概率质量函数 $p_Y(y)$ 。

表 1 总结各种“花式玩法”样本空间，以及概率质量函数 $p_Y(y)$ 。表 1 中概率质量函数图像的横纵轴取值范围完全相同。请大家逐个分析，特别注意概率质量函数的分布规律。

表 1. 基于抛两枚色子试验结果的更多花式玩法

随机变量的函数	样本空间	样本位置	概率质量函数
---------	------	------	--------

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

$Y = X_1$	$\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$		
$Y = X_1^2$	$\{1, 4, 9, 16, 25, 36\}$		
$Y = X_1 + X_2$	$\{2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12\}$		
$Y = \frac{X_1 + X_2}{2}$	$\{1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0, 4.5, 5.0, 5.5, 6.0\}$		
$Y = \frac{X_1 + X_2 - 7}{2}$	$\{-2.5, -2.0, -1.5, -1.0, -0.5, 0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5\}$		

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

$Y = X_1 X_2$	{1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 10, 12, 15, 16, 18, 20, 24, 25, 30, 36}		
$Y = \frac{X_1}{X_2}$	{0.166, 0.2, 0.25, 0.333, 0.4, 0.5, 0.6, 0.666, 0.75, 0.8, 0.833, 1.0, 1.2, 1.25, 1.333, 1.5, 1.666, 2.0, 2.5, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0}		
$Y = X_1 - X_2$	{-5, -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4, 5}		
$Y = X_1 - X_2 $	{0, 1, 2, 3, 4, 5}		

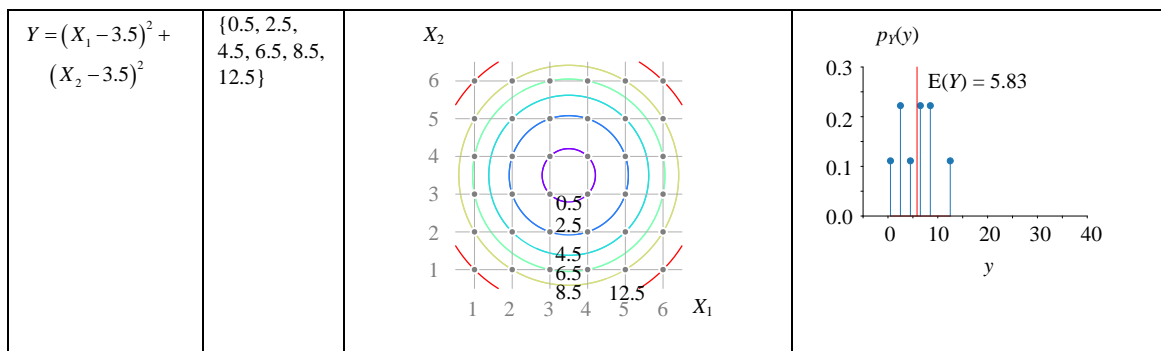
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

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



代码 Bk5_Ch04_01.py 绘制表 1 中图像。学完本章后续内容后，请大家修改代码计算 Y 标准差 $\text{std}(Y)$ ，并在火柴梗图上展示 $E(Y) \pm \text{std}(Y)$ 。

归一律

一元离散随机变量 X 的概率质量函数 $p_X(x)$ 有如下重要性质：

$$\sum_x p_X(x) = 1, \quad 0 \leq p_X(x) \leq 1$$



(7)

上式实际上就是“穷举法”，即遍历所有 X 取值，将它们的概率值求和，结果为 1。“穷举法”也叫归一律。

▲ 值得强调的是，概率质量函数 $p_X(x)$ 最大取值为 1。

概率密度函数 PDF

与 PMF 相对的是**概率密度函数** (probability density function, PDF)。PDF 对应连续随机变量，本书用小写斜体字母 f 表达 PDF，比如连续随机变量 X 的概率密度函数记做 $f_X(x)$ 。

▲ 注意，在本书第 20、21 章中讲解贝叶斯推断时，为了方便，概率质量函数、概率密度函数都用 $f()$ 来表达。

当连续随机变量取不同值时，概率密度函数 $f_X(x)$ 用积分方式得到概率值。因此， $f_X(x)$ 对应的数学运算符是积分符号 \int 。

举个例子，连续随机变量 X 服从标准正态分布 $N(0, 1)$ ，其 PDF 为：

$$f_X(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (8)$$

其中，变量 x 的取值范围为整个实数轴；对于标准正态分布 $N(0, 1)$ ，其 $f_X(x)$ 取值可以无限接近 0，却不为 0。

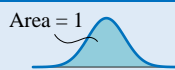
当 $x = 0$ 时， $f_X(x)$ 约为 0.4，这个值是概率密度，不是概率。只有对连续随机变量 PDF 在指定区间内进行积分后结果才“可能”是概率。

▲ 注意，联合概率密度函数 $f_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, x_3)$ “偏积分”结果还是概率密度。 $f_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, x_3)$ 三重积分结果才是概率值。

▲ 值得反复强调的是，PMF 本身就是概率，对应的数学工具为 Σ 求和。PDF 积分后才可能是概率，对应的数学工具为 \int 积分。

一元连续随机变量 X 的概率密度函数 $f_X(x)$ 也有如下重要性质：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_X(x) dx = 1, \quad f_X(x) \geq 0$$



(9)

上式也相当于是“穷举法”。

▲ 注意，概率密度函数 $f_X(x)$ 取值非负，但是不要求小于 1。本书后续将给出具体示例。

概率质量函数 PMF、概率密度函数 PDF 是特殊的函数。特殊之处在于它们的输入为随机变量的取值，输出为概率质量、概率密度。但是，本质上，它们又都是函数。所以，我们可以把函数的分析工具用在概率质量函数 PMF、概率密度函数 PDF 上。

➡ 本章和下一章首先讲解离散随机变量、离散分布。本书第 6、7 章讲解连续随机变量、连续分布。

区分符号

有必要再次区分本系列丛书的容易混淆的代数、线性代数、概率统计符号。以下内容主要来自《矩阵力量》第 23 章，稍作改动。

粗体、斜体、小写 \mathbf{x} 为列向量。从概率统计的角度， \mathbf{x} 可以代表随机变量 X 采样得到的样本数据，偶尔也代表 X 总体数据。随机变量 X 样本“无序”集合为 $X = \{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}\}$ 。很多时候，随机变量 X 样本本身也可以看成“有序”的数组，即向量。

粗体、斜体、小写、加下标序号的 \mathbf{x}_1 为列向量，下角标仅仅是序号，以便区分，比如 \mathbf{x}_1 、 \mathbf{x}_2 、 \mathbf{x}_j 、 \mathbf{x}_D 等等。从概率统计的角度， \mathbf{x}_1 可以代表随机变量 X_1 样本数据，也可以表达 X_1 总体数据。

行向量 $\mathbf{x}^{(1)}$ 代表一个具有多个特征的样本点。

▲ 注意，在机器学习算法中，为了方便， $\mathbf{x}^{(i)}$ 偶尔也代表列向量。

从代数角度，斜体、小写、非粗体 x_1 代表变量，下角标代表变量序号。这种记法常用在函数解析式中，比如线性回归解析式 $y = x_1 + x_2$ 。在概率质量函数、概率密度函数中，它们也用做 PMF、PDF 函数输入，比如 $p_{X1}(x_1)$ 、 $f_{X2}(x_2)$ 。

\mathbf{x} 也代表变量构成的列向量， $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_D]^T$ ，比如多元概率密度函数 $f_{\mathbf{X}}(\mathbf{x})$ 的输入。

$x^{(1)}$ 代表变量 x 的一个取值，或代表随机变量 X 的一个取值。

而 $x_1^{(1)}$ 代表变量 x_1 的一个取值，或代表随机变量 X_1 的一个取值，比如 $X_1 = \{x_1^{(1)}, x_1^{(2)}, \dots, x_1^{(n)}\}$ 。

粗体、斜体、大写 \mathbf{X} 则专门用来表达多行、多列的数据矩阵， $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D]$ 。数据矩阵 \mathbf{X} 中第 i 行、第 j 列元素则记做 $x_{i,j}$ 。多元线性回归中， \mathbf{X} 也叫**设计矩阵** (design matrix)。

我们还会用粗体、斜体、小写希腊字母 χ (chi, 读作/'kaɪ/) 代表 D 维随机变量构成的列向量， $\chi = [X_1, X_2, \dots, X_D]^T$ 。希腊字母 χ 主要用在多元概率统计中，比如，多元概率密度函数 $f_{\chi}(\mathbf{x})$ 、期望值列向量 $E(\chi)$ 。

4.2 期望值：随机变量的可能取值加权平均

期望值

离散随机变量 X 有 n 个取值 $\{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(n)}\}$ ， X 的**期望** (expectation)，也叫**期望值** (expected value)， $E(X)$ 为：

$$E(X) = \mu_X = \underbrace{x^{(1)} p_X(x^{(1)}) + x^{(2)} p_X(x^{(2)}) + \dots + x^{(n)} p_X(x^{(n)})}_{\text{Weight}} = \sum_{i=1}^n x^{(i)} \cdot \underbrace{p_X(x^{(i)})}_{\text{Weight}} \quad (10)$$

Scalar

上式相当于加权平均数，边缘 PMF $p_X(x)$ 代表权重。

运算符 $E()$ 把随机变量一系列取值转化成了一个标量数值，这相当于降维。如图 7 所示，从矩阵乘法角度，计算期望值 $E(X)$ 相当于将 X 这个维度折叠。

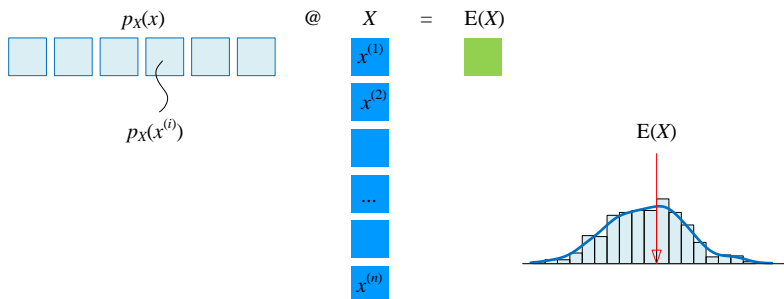


图 7. 计算离散随机变量 X 期望值/均值

为了方便，我们经常把 (10) 简写作：

$$E(X) = \sum_x x \cdot p_X(x) \quad \text{图 5 中随机变量 } X \text{ 的期望值为:}$$
(11)

$\sum_x (\cdot)$ 代表对 x 的遍历，也就是穷举。求加权平均值时，权重之和为 1，也就是说边缘 PMF $p_X(x)$ 满足 $\sum_x p_X(x) = 1$ 。特别是对于多元随机变量，我们也经常把期望值 (均值) 叫做**质心** (centroid)。

举个例子

图 5 中随机变量 X 的期望值为：

$$E(X) = \sum_x x \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Weight}} = \sum_x x \cdot \frac{1}{6} = 1 \times \frac{1}{6} + 2 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{6} + 4 \times \frac{1}{6} + 5 \times \frac{1}{6} + 6 \times \frac{1}{6} = 3.5 \quad (12)$$

大家已经发现上式中随机变量 X 的概率质量函数为定值。这和求样本均值的情况类似。求样本均值时，我们用到的权重为 $1/n$ ，即每个样本赋予相同的权重。

图 8 所示为投色子试验均值随试验次数变化。随着重复次数接近无穷大，试验结果的算术平均值 (试验概率) 收敛于 3.5 (理论值)。

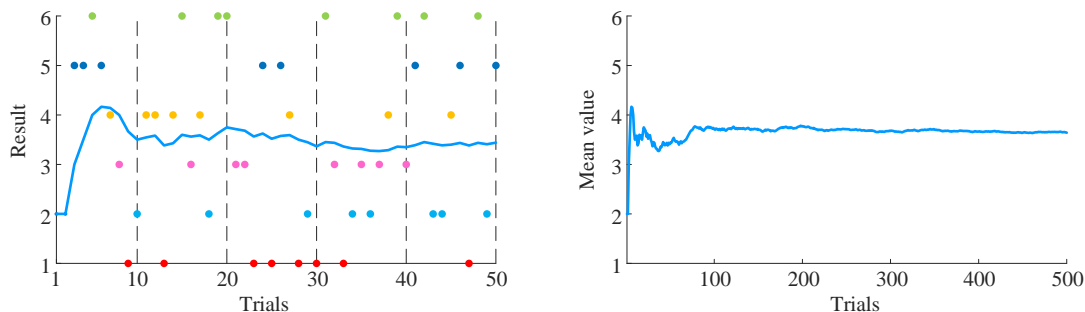


图 8. 投色子试验均值随试验次数变化

重要性质

请大家注意以下几个有关期望的性质：

$$\begin{aligned} E(aX) &= aE(X) \\ E(X + Y) &= E(X) + E(Y) \end{aligned} \quad (13)$$

如果 X 和 Y 独立：

$$E(XY) = E(X)E(Y) \quad (14)$$

此外，请大家注意：

$$E\left(\sum_{i=1}^n a_i X_i\right) = \sum_{i=1}^n a_i E(X_i) \quad (15)$$

特别地，当 $n = 2$ 时，上式可以写成：

$$E(a_1 X_1 + a_2 X_2) = a_1 E(X_1) + a_2 E(X_2) \quad (16)$$

(16) 可以写成如下矩阵乘法运算：

$$E(a_1 X_1 + a_2 X_2) = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} E(X_1) \\ E(X_2) \end{bmatrix}}_{\mu} \quad (17)$$

同理，(15) 可以写成：

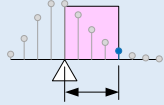
$$E\left(\sum_{i=1}^n a_i X_i\right) = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E(X_1) \\ E(X_2) \\ \vdots \\ E(X_n) \end{bmatrix} \quad (18)$$

请大家自己把矩阵乘法运算示意图画出来。

4.2 方差：随机变量离期望距离平方的平均值

方差

随机变量 X 另外一个重要特征是**方差** (variance)，记做 $\text{var}(X)$ 。对于离散随机变量 X ，方差用来度量 X 和数学期望 $E(X)$ 之间的偏离程度。具体定义为：

$$\text{var}(X) = E\left[\underbrace{\left(\underbrace{X - E(X)}_{\text{Deviation}}\right)^2}_{\text{Expectation}}\right] = \sum_x \underbrace{\left(x - E(X)\right)^2}_{\text{Demean}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Weight}} \quad (19)$$


上式中 $x - E(X)$ 代表以期望值 $E(X)$ 为参照，样本点 x 的偏离量。如图 9 所示， $X - E(X)$ 代表**去均值** (demean)，也叫**中心化** (centralize)。

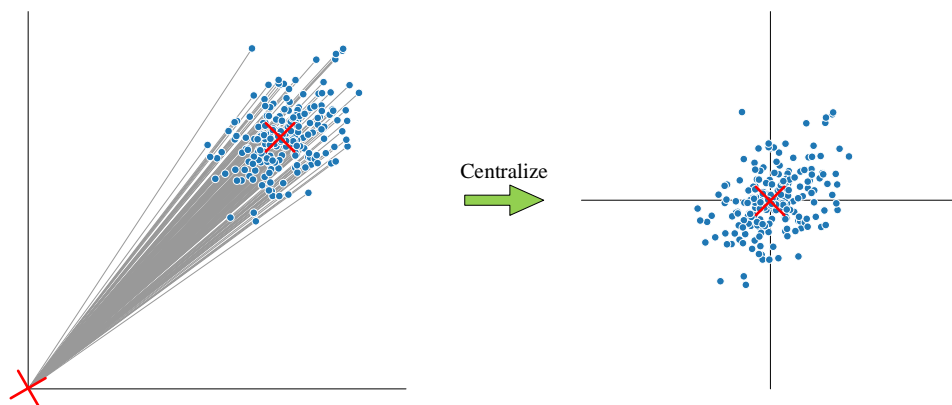


图 9. 样本去均值

观察 (19)，容易发现方差实际上是 $(X - E(X))^2$ 的期望值。(19) 就是求 $(x - E(X))^2$ 的加权平均数，权重为 $p_X(x)$ 。从几何角度， $(X - E(X))^2$ 代表以 $|X - E(X)|$ 为边长的正方形的面积。而对于离散随机变量， $p_X(x)$ 就是权重，体现不同样本重要性。

举个例子

图 5 对应的方差为：

$$\begin{aligned} \text{var}(X) &= \frac{1}{6} \times (1 - 3.5)^2 + \frac{1}{6} \times (2 - 3.5)^2 + \frac{1}{6} \times (3 - 3.5)^2 + \frac{1}{6} \times (4 - 3.5)^2 + \frac{1}{6} \times (5 - 3.5)^2 + \frac{1}{6} \times (6 - 3.5)^2 \\ &= \frac{1}{6} \times \left(\frac{25}{4} + \frac{9}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{9}{4} + \frac{25}{4} \right) = \frac{35}{12} \approx 2.9167 \end{aligned} \quad (20)$$

注意，本书前文在计算样本方差时，分母除以 $n - 1$ 。而 (20) 分母相当于除以 n ，这是因为 (20) 是对总体求方差。而且，恰好 X 取 1 ~ 6 这六个不同值是对应的概率相等。

也就是说，当离散随机变量 X 等概率时，概率质量函数为：

$$p_X(x) = \frac{1}{n} \quad (21)$$

(19) 可以写成：

$$\text{var}(X) = \frac{1}{n} \sum_x (x - E(X))^2 \quad (22)$$

再次强调，上式是求离散随机变量方差的一种特殊情况（离散均匀分布）。统计中，样本的方差计算方法类似上式，不过要将分母中的 n 换成 $n - 1$ 。

技巧：方差计算

方差有个简便算法：

$$\text{var}(X) = \underbrace{E(X^2)}_{\text{Expectation of } X^2} - \underbrace{E(X)^2}_{\text{Square of } E(X)} \quad (23)$$

其中， $E(X^2)$ 为：

$$\underbrace{E(X^2)}_{\text{Expectation of } X^2} = \sum_x x^2 \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Weight}} \quad (24)$$

(23) 的推导过程如下所示：

$$\begin{aligned} \text{var}(X) &= E\left((X - E(X))^2\right) \\ &= E\left(X^2 - 2X \cdot E(X) + E(X)^2\right) \\ &= E(X^2) - 2E(X) \cdot E(X) + E(X)^2 \\ &= E(X^2) - E(X)^2 \end{aligned} \quad (25)$$

注意，(23) 也适用于连续随机变量。请大家尝试使用 (25) 计算 (20) 的方差。

几何意义

下面我们聊聊 (25) 的几何含义。

方差度量离散程度，本质上来说是“自己”和“自己”比较的产物。前一个“自己”是 X 每个样本，后一个“自己”是代表 X 整体位置的期望值 $E(X)$ 。

如图 10 所示，方差 $\text{var}(X)$ 代表样本以**质心** (centroid) 为基准的离散程度。

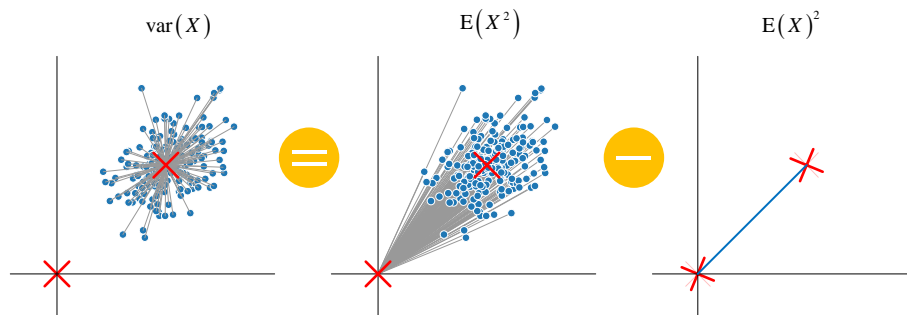


图 10. 几何视角理解计算方差技巧

(23) 中，计算方差 $\text{var}(X)$ 有 $E(X^2)$ 和 $-E(X)^2$ 两部分。

$E(X^2)$ 度量 X 样本以**原点** (origin) 为基准的离散程度。

$E(X)^2$ 则代表 X 整体，即 $E(X)$ ，相对于原点的离散程度。 $-E(X)^2$ 中的“负号”代表将基准从原点移到质心。

特别地，当 X 的质心位于原点，即 $E(X) = 0$ 时， $\text{var}(X)$ 为：

$$\text{var}(X) = E(X^2) \quad (26)$$

标准差

标准差 (standard deviation) 是方差的平方根：

$$\text{std}(X) = \sigma_X = \sqrt{\text{var}(X)} \quad (27)$$

方差既然可以用来度量“离散程度”，为什么我们还需要标准差？

简单来说，标准差 σ_X 、期望值 $E(X)$ 、随机变量 X 为同一量纲。比如，鸢尾花花萼长度 X 的单位是 cm，期望值 $E(X)$ 的单位也是 cm，而 σ_X 的单位也对应是 cm。但是， $\text{var}(X)$ 的量纲是 cm^2 。

需要注意的性质

请大家注意以下方差性质：

$$\begin{aligned} \text{var}(a) &= 0 \\ \text{var}(X + a) &= \text{var}(X) \\ \text{var}(aX) &= a^2 \text{var}(X) \\ \text{var}(aX + b) &= a^2 \text{var}(X) \\ \text{var}(X + Y) &= \text{var}(X) + \text{var}(Y) + 2\text{cov}(X, Y) \end{aligned} \quad (28)$$

其中 $\text{cov}(X, Y)$ 为随机变量 X 和 Y 的协方差，本章后续将专门介绍协方差。

请大家注意以下标准差性质：

$$\begin{aligned} \sigma(a) &= 0 \\ \sigma(X + a) &= \sigma(X) \\ \sigma(bX) &= |b| \sigma(X) \\ \sigma(a + bX) &= |b| \sigma(X) \\ \sigma(X + Y) &= \sqrt{\sigma^2(X) + \sigma^2(Y) + 2\rho(X, Y)\sigma(X)\sigma(Y)} \end{aligned} \quad (29)$$

汇总

折叠、总结、汇总、降维、压扁 ... 本章及本书后文会用这些字眼形容期望值、方差、标准差。这是因为，计算期望值、方差、标准差时，我们不再关注随机变量样本具体取值，而是在乎某种方式的**汇总** (aggregation)。期望值、方差、标准差将“数组”转化成特定标量值。

如果汇总的形式为期望，它相当于找到随机变量整体的“位置”。如果汇总的形式为方差、标准差，两者都度量随机变量“离散”程度。

其他常用的汇总形式还包括：**计数** (count)、**求和** (sum)、**四分位** (quartile)、**百分位** (percentile)、**最大值** (maximum)、**最小值** (minimum)、**中位数** (median)、**众数** (mode)、偏度、峰度等等。

4.3 累积分布函数 CDF：累加

对于离散随机变量，**累积分布函数** (Cumulative Distribution Function, CDF) 对应概率质量函数的求和。

对于离散随机变量 X ，累积分布函数 $F_X(x)$ 的定义为：

$$F_X(x) = \Pr(X \leq x) = \sum_{t \leq x} p_X(t) \quad (30)$$

上式相当于累加概念，累加从 X 最小样本值开始并截止于 $X = x$ 。

离散随机变量 X 的取值范围为 $a < X \leq b$ 时，对应的概率可以利用 CDF 计算：

$$\Pr(a < X \leq b) = F_X(b) - F_X(a) \quad (31)$$

图 5 对应的 CDF 图像为图 11。

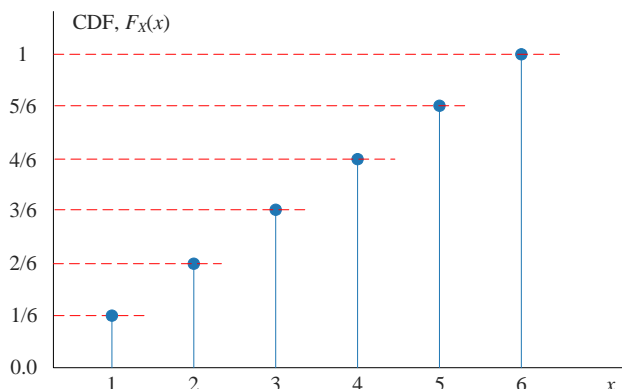


图 11. 随机变量 X 的 CDF

⚠ 注意，对于离散随机变量，区间端点的开闭影响结果。

以图 11 为例，请大家比较以下四个不同开闭区间的概率值：

$$\Pr(1 < X \leq 3) = \frac{1}{3}, \quad \Pr(1 \leq X \leq 3) = \frac{1}{2}, \quad \Pr(1 \leq X < 3) = \frac{1}{3}, \quad \Pr(1 < X < 3) = \frac{1}{6} \quad (32)$$

对于连续随机变量，就没有区间端点的麻烦了。本书后续将展开讲解。

4.4 二元离散随机变量

假设同一个试验中，有两个离散随机变量 X 和 Y 。二元随机变量 (X, Y) 概率取值可以用**联合概率质量函数** (joint Probability Mass Function, joint PMF) $p_{X,Y}(x, y)$ 刻画。

概率质量函数 $p_{X,Y}(x, y)$ 代表事件 $\{X = x, Y = y\}$ 发生的联合概率：

$$\underbrace{p_{X,Y}(x, y)}_{\text{Joint}} = \Pr(X = x, Y = y) = \Pr(X = x \cap Y = y) \quad (33)$$

⚠ 再次强调，对于二元离散随机变量， $p_{X,Y}(x, y)$ 本身就是概率值。

图 12 所示为二元离散随机变量 (X, Y) 的样本空间 Ω ，空间中共有 81 个点。从函数角度来看， $p_{X,Y}(x, y)$ 是个二元函数。因此，我们可以用二元函数的分析方法来讨论 $p_{X,Y}(x, y)$ 。



《数学要素》第 13 章介绍二元函数，建议大家回顾。

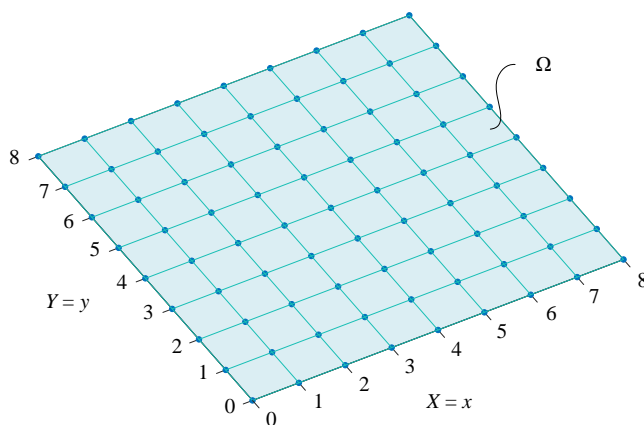


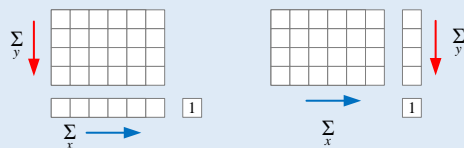
图 12. 二元随机变量的样本空间

取值

图 13 所示为二元联合概率质量函数 $p_{X,Y}(x, y)$ 的取值表格。图 13 同时用热图来可视化 $p_{X,Y}(x, y)$ 。

二元联合概率质量函数 $p_{X,Y}(x, y)$ 也有一条重要的性质：

$$\sum_x \sum_y \underbrace{p_{X,Y}(x, y)}_{\text{Joint}} = \sum_y \sum_x \underbrace{p_{X,Y}(x, y)}_{\text{Joint}} = 1, \quad 0 \leq p_{X,Y}(x, y) \leq 1$$



(34)

也就是说，图 13 这幅热图中所有数值（概率，概率质量）求和的结果为 1，和求和顺序无关。

		X = x								
Joint, $p_{X,Y}(x,y)$		0	1	2	3	4	5	6	7	8
Y = y	8	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	7	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0003	0.0004	0.0002	0.0001
	6	0.0000	0.0000	0.0001	0.0005	0.0014	0.0025	0.0030	0.0020	0.0006
	5	0.0000	0.0001	0.0005	0.0022	0.0064	0.0119	0.0138	0.0092	0.0027
	4	0.0000	0.0002	0.0014	0.0064	0.0185	0.0346	0.0404	0.0269	0.0078
	3	0.0000	0.0003	0.0025	0.0119	0.0346	0.0646	0.0753	0.0502	0.0146
	2	0.0000	0.0004	0.0030	0.0138	0.0404	0.0753	0.0879	0.0586	0.0171
	1	0.0000	0.0002	0.0020	0.0092	0.0269	0.0502	0.0586	0.0391	0.0114
	0	0.0000	0.0001	0.0006	0.0027	0.0078	0.0146	0.0171	0.0114	0.0033

图 13. 概率质量函数 $p_{X,Y}(x, y)$ 取值

火柴梗图

二元联合概率质量函数 $p_{X,Y}(x, y)$ 长成什么样子呢？

火柴梗图最适合可视化概率质量函数，如图 14 所示。

▲ 注意，为了展示火柴梗图分别沿 X 、 Y 方向变化趋势，图 14 将火柴梗散点连线。一般情况下，火柴梗图不存在连线。

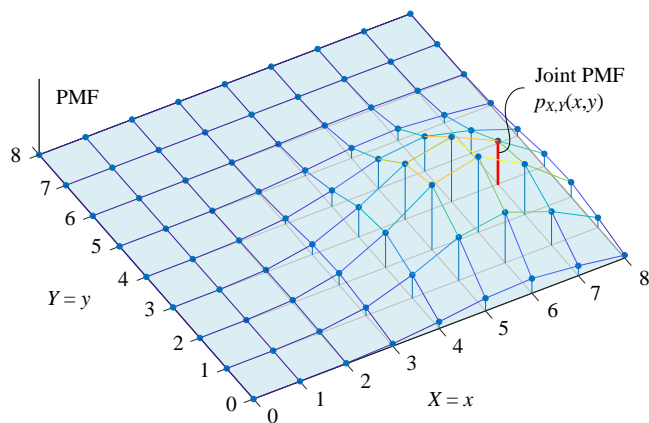


图 14. $p_{X,Y}(x, y)$ 对应的二维火柴梗图

4.5 协方差、相关性系数

本书读者对协方差、相关性系数这两个概念应该不陌生，本节简要介绍如何求解离散随机变量的协方差和相关性系数。

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。

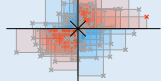
代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

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

协方差

二元离散随机变量 (X, Y) 的协方差定义为：

$$\text{cov}(X, Y) = E((X - E(X))(Y - E(Y))) \quad (35)$$


如果 (X, Y) 的概率质量函数为 $p_{X,Y}(x, y)$, X 的取值为 $x^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots, n$), Y 的取值为 $y^{(j)}$ ($j = 1, 2, \dots, m$)。 (35) 可以展开写成：

$$\begin{aligned} \text{cov}(X, Y) &= E((X - E(X))(Y - E(Y))) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m p_{X,Y}(x^{(i)}, y^{(j)}) (x^{(i)} - E(X))(y^{(j)} - E(Y)) \end{aligned} \quad (36)$$

其中,

$$E(X) = \sum_x x \cdot p_X(x), \quad E(Y) = \sum_y y \cdot p_Y(y) \quad (37)$$

(36) 常简写为：

$$\text{cov}(X, Y) = \sum_x \sum_y p_{X,Y}(x, y) (x - E(X))(y - E(Y)) \quad (38)$$

类似方差，协方差运算也有如下技巧：

$$\begin{aligned} \text{cov}(X, Y) &= E(XY) - E(X)E(Y) \\ &= \sum_x \sum_y x \cdot y \cdot p_{X,Y}(x, y) - \left(\sum_x x \cdot p_X(x) \right) \cdot \left(\sum_y y \cdot p_Y(y) \right) \end{aligned} \quad (39)$$

(39) 推导过程具体如下：

$$\begin{aligned} \text{cov}(X, Y) &= E((X - E(X))(Y - E(Y))) \\ &= E(XY - E(X)Y - XE(Y) + E(X)E(Y)) \\ &= E(XY) - E(X)E(Y) - E(X)E(Y) + E(X)E(Y) \\ &= E(XY) - E(X)E(Y) \end{aligned} \quad (40)$$

相关性

(X, Y) 相关性的定义为：

$$\rho_{X,Y} = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (41)$$

展开得到：

$$\rho_{x,y} = \frac{E(XY) - E(X)E(Y)}{\sqrt{E(X^2) - E(X)^2} \sqrt{E(Y^2) - E(Y)^2}} \quad (42)$$

相关性的取值范围 $[-1, 1]$ 。相对协方差，相关性更适合横向比较。



本书第 10 章将专门讲解相关性。

协方差性质

请大家注意以下协方差性质：

$$\begin{aligned} \text{cov}(X, a) &= 0 \\ \text{cov}(X, X) &= \text{var}(X) \\ \text{cov}(X, Y) &= \text{cov}(Y, X) \\ \text{cov}(aX, bY) &= ab \text{cov}(X, Y) \\ \text{cov}(X + a, Y + b) &= \text{cov}(X, Y) \\ \text{cov}(aX + bY, Z) &= a \text{cov}(X, Z) + b \text{cov}(Y, Z) \\ \text{cov}(aX + bY, cW + dV) &= ac \text{cov}(X, W) + ad \text{cov}(X, V) + bc \text{cov}(Y, W) + bd \text{cov}(Y, V) \end{aligned} \quad (43)$$

此外，方差和协方差的关系：

$$\text{var}\left(\sum_{i=1}^n a_i X_i\right) = \sum_i a_i^2 \text{var}(X_i) + 2 \sum_{i,j,i < j} a_i a_j \text{cov}(X_i, X_j) = \sum_{i,j} a_i a_j \text{cov}(X_i, X_j) \quad (44)$$

特别地，当 $n = 2$ 时，上式可以写成：

$$\text{var}(a_1 X_1 + a_2 X_2) = a_1^2 \text{var}(X_1) + a_2^2 \text{var}(X_2) + 2a_1 a_2 \text{cov}(X_1, X_2) \quad (45)$$



看到 (45) 大家是否立刻想到我们在《矩阵力量》第 5 章介绍过的二次型 (quadratic form)。

(45) 可以写成如下矩阵乘法运算：

$$\text{var}(a_1 X_1 + a_2 X_2) = \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}}_a^T \underbrace{\begin{bmatrix} \text{var}(X_1) & \text{cov}(X_1, X_2) \\ \text{cov}(X_1, X_2) & \text{var}(X_2) \end{bmatrix}}_{\Sigma} \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}}_a = a^T \Sigma a \quad (46)$$

同理，(44) 可以写成：

$$\text{var}\left(\sum_{i=1}^n a_i X_i\right) = \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}}_a^T \underbrace{\begin{bmatrix} \text{cov}(X_1, X_1) & \text{cov}(X_1, X_2) & \cdots & \text{cov}(X_1, X_n) \\ \text{cov}(X_2, X_1) & \text{cov}(X_2, X_2) & \cdots & \text{cov}(X_2, X_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}(X_n, X_1) & \text{cov}(X_n, X_2) & \cdots & \text{cov}(X_n, X_n) \end{bmatrix}}_{\Sigma} \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}}_a = a^T \Sigma a \quad (47)$$



本书第 14 章将从向量投影视角深入讲解上式。

几何视角

对于如下等式，

$$\text{var}(X + Y) = \text{var}(X) + \text{var}(Y) + 2\text{cov}(X, Y) \quad (48)$$

即，

$$\sigma_{X+Y}^2 = \sigma_X^2 + \sigma_Y^2 + 2\rho_{X,Y}\sigma_X\sigma_Y \quad (49)$$

看到上式，大家是否立刻联想到《数学要素》第 3 章介绍的**余弦定律** (law of cosines):

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab\cos\theta \quad (50)$$

σ_X 、 σ_Y 、 σ_{X+Y} 相当于三角形的三个边， $\rho_{X,Y}$ 相当 σ_X 、 σ_Y 于夹角的余弦值。如图 15 所示，当 $\rho_{X,Y}$ 取不同值时，三角形呈现不同的形态。



另外一个视角就是《矩阵力量》介绍的“标准差向量”，请大家回顾。

特别地，如果 $\rho_{X,Y} = 0$ ，三角形为直角三角形，满足：

$$\sigma_{X+Y}^2 = \sigma_X^2 + \sigma_Y^2 \quad (51)$$

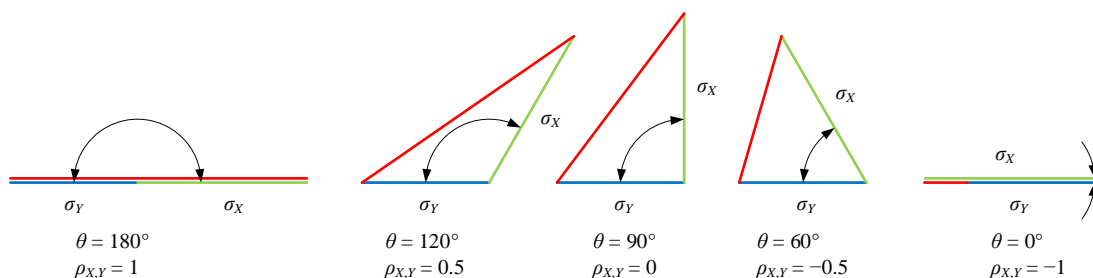


图 15. 将余弦定理用到方差等式



此外，《矩阵力量》第 22 章还专门类比向量内积和协方差，建议大家回顾。


4.6 边缘概率：偏求和，相当于降维

边缘概率 (marginal probability) 是某个事件发生的概率，而与其它事件无关。对于离散随机变量来说，利用全概率定理，也就是穷举法，我们可以把联合概率结果中不需要的那些事件全部合并。合并的过程叫做**边缘化** (marginalization)。

➡ 对于多元离散随机变量，边缘化用到的数学工具为《数学要素》第 14 章讲到的“偏求和”。

边缘概率 $p_X(x)$

根据全概率公式，对于二元联合概率质量函数 $p_{X,Y}(x, y)$ ，求解边缘概率 $p_X(x)$ 相当于利用“偏求和”消去 y ：

$$\underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} = \sum_y \underbrace{p_{X,Y}(x, y)}_{\text{Joint}}$$

(52)

也就是说，在 $X = x$ 取值条件下， $p_{X,Y}(x, y)$ 对所有 y 的求和。

从函数角度来看， $p_{X,Y}(x, y)$ 是个二元函数， $p_X(x)$ 是个一元函数。

从矩阵运算角度来看， $p_{X,Y}(x, y)$ 代表矩阵，矩阵沿 Y 方向求和，折叠得到行向量 $p_X(x)$ 。行向量 $p_X(x)$ 进一步求和结果为标量 1，对应样本空间概率。反方向来看，概率 1 沿 X 和 Y 展开，相当于“切片、切丝”。

举个例子

如图 16 所示，当 $X = 6$ 时，将整个一列的 $p_{X,Y}(6, y)$ 求和得到 $p_X(6) = 0.2965$ 。请大家自己验算当 X 取其他值时，边缘概率 $p_X(x)$ 的具体值。

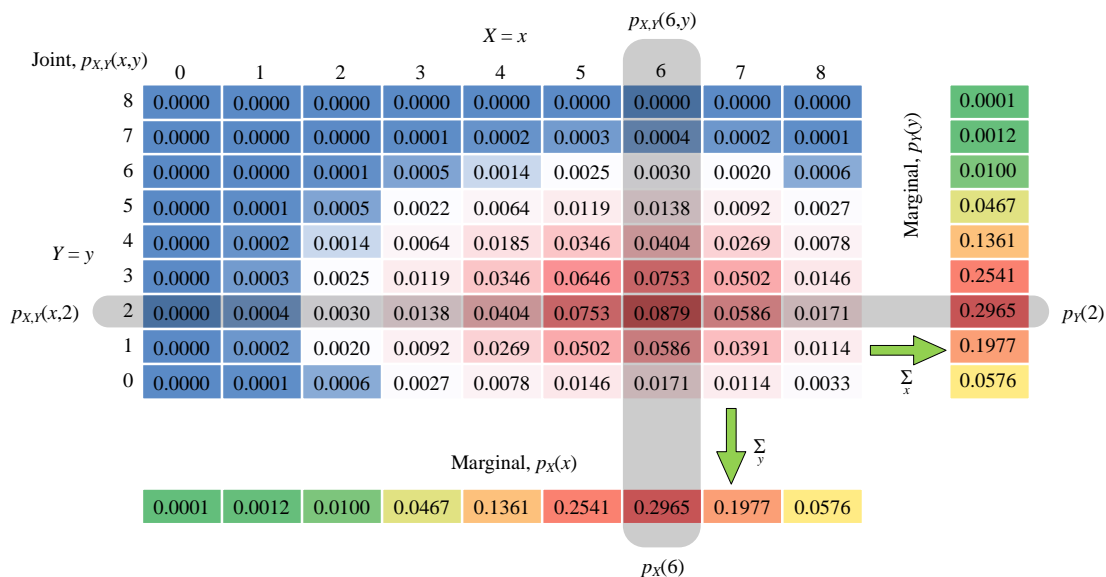


图 16. 利用联合概率计算边缘概率

边缘概率 $p_Y(y)$

同理， $p_{X,Y}(x, y)$ 对 x “偏求和”消去 x 得到 $p_Y(y)$ ：

$$\underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} = \sum_x \underbrace{p_{X,Y}(x, y)}_{\text{Joint}} \quad (53)$$

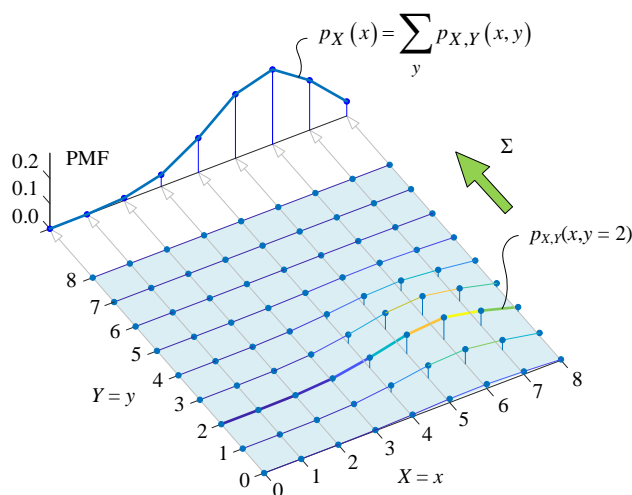
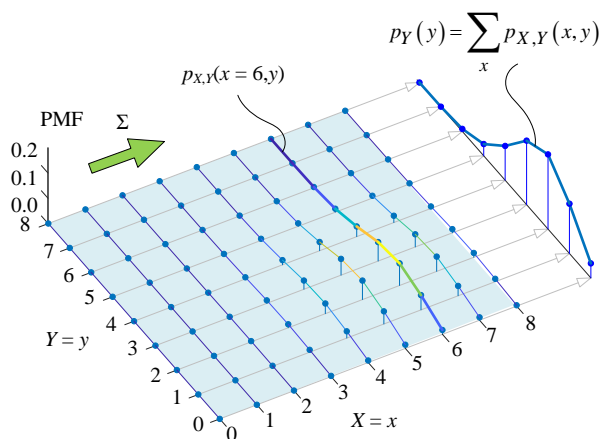
图 16 所示，当 $Y = 2$ 时，将整个一行的 $p_{X,Y}(x, 2)$ 相加得到 $p_Y(2) = 0.2965$ 。

从函数角度来看， $p_Y(y)$ 也是个一元离散函数。

从矩阵运算角度来看，矩阵 $p_{X,Y}(x, y)$ 沿 X 方向求和，折叠得到列向量 $p_Y(y)$ 。列向量 $p_Y(y)$ 进一步折叠结果同样为标量 1。

几何视角：叠加

显然，边缘分布 $p_X(x)$ 和 $p_Y(y)$ 本身也是概率质量函数。从图像上来看， $p_X(x)$ 相当于 $p_{X,Y}(x, y)$ 中 y 在取不同值时对应的火柴梗图叠加得到，具体如图 17 所示。同理，图 18 所示为边缘分布 $p_Y(y)$ 求解过程。

图 17. 边缘分布 $p_X(x)$ 求解过程图 18. 边缘分布 $p_Y(y)$ 求解过程

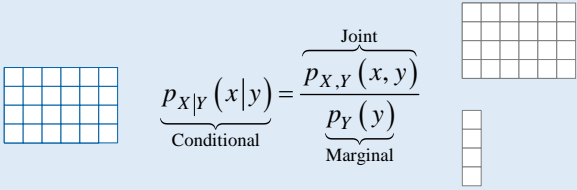
4.7 条件概率：引入贝叶斯定理

本节利用贝叶斯定理，介绍如何求解离散随机变量的条件概率质量函数。

联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ → 条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$

假设事件 $\{Y=y\}$ 已经发生，即 $p_Y(y) > 0$ 。在给定事件 $\{Y=y\}$ 条件下，事件 $\{X=x\}$ 发生的概率可以用条件概率质量函数 $p_{X|Y}(x|y)$ 表达。也就是说，对于 $p_{X|Y}(x|y)$ ， $\{Y=y\}$ 是新的样本空间。

利用贝叶斯定理，条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 可以用联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 除以边缘概率 $p_Y(y)$ 得到：

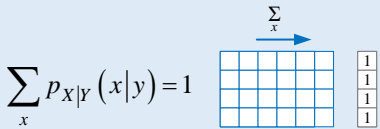


$$p_{X|Y}(x|y) = \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}}} \quad (54)$$

从函数角度来看， $p_{X|Y}(x|y)$ 本质上也是个二元函数。首先， $p_{X|Y}(x|y)$ 显然随着 $X=x$ 变化。虽然 $Y=y$ 为条件，但是这个条件也可以变动。 $Y=y$ 变动就会导致概率质量函数 $p_{X|Y}(x|y)$ 变化。

从矩阵运算角度来看， $p_{X,Y}(x,y)$ 相当于矩阵， $p_Y(y)$ 相当于列向量。两者相除用到《矩阵力量》第 4 章讲的**广播原则** (broadcasting)。得到的条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 也是个矩阵，形状和 $p_{X,Y}(x,y)$ 一致。

$p_{X|Y}(x|y)$ 对 x 求和等于 1：



$$\sum_x p_{X|Y}(x|y) = 1 \quad (55)$$

也就是说， $p_{X|Y}(x|y)$ 矩阵的每一行求和结果为 1。也就是说，每一行代表一个不同的“样本空间”。

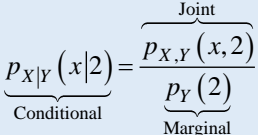
换个视角来看，条件概率的“条件”就是“新的样本空间”，这个新的样本空间对应概率为 1。

举个例子

如图 19 所示， $Y=2$ 时，边缘概率 $p_Y(Y=2)$ 可以通过求和得到：

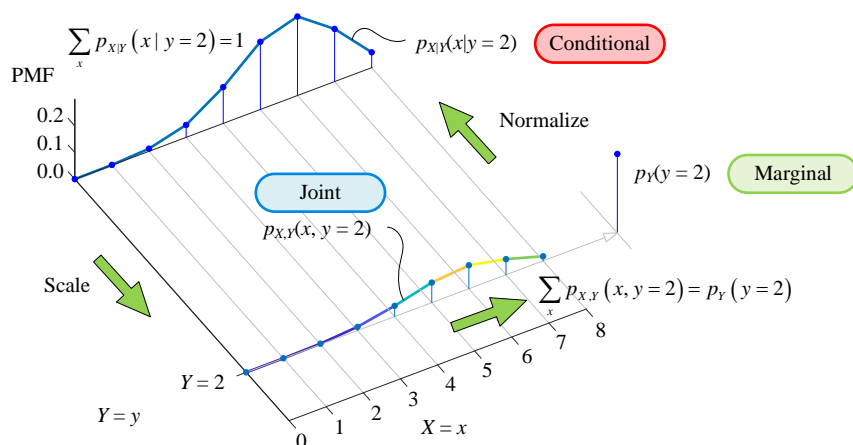
$$p_Y(2) = \sum_x p_{X,Y}(x,2) \quad (56)$$

$p_Y(2)$ 为一定值。给定 $Y=2$ 作为条件时，条件概率 $p_{X|Y}(x|2)$ 通过下式得到：



$$\underbrace{p_{X|Y}(x|2)}_{\text{Conditional}} = \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,2)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{p_Y(2)}_{\text{Marginal}}} \quad (57)$$

观察图 19，发现 $p_{X,Y}(x,2)$ 到 $p_{X|Y}(x|2)$ 相当于曲线缩放过程。

图 19. 求解条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 的过程

进一步，条件概率 $p_{X|Y}(x|2)$ 对 x 求和得到 1：

$$\sum_x p_{X|Y}(x|2) = \frac{\sum_x p_{X,Y}(x, 2)}{p_Y(2)} = \frac{p_Y(2)}{p_Y(2)} = 1 \quad (58)$$

$p_{X,Y}(x, 2)$ 到 $p_{X|Y}(x|2)$ 是一个**归一化** (normalization) 过程。也就是说，上式分母中的 $p_Y(y)$ 是一个归一化系数。

引入贝叶斯定理，边缘概率 $p_X(x)$ 相当于是条件概率的加权平均：

$$\underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} = \sum_y \underbrace{p_{X,Y}(x, y)}_{\text{Joint}} = \sum_y \underbrace{p_{X|Y}(x|y)}_{\text{Conditional}} \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \quad (59)$$

当给定 $Y = y$ 条件下，通过“穷举法”，所有的条件概率值之和为 1。

条件概率 $p_{X|Y}(x|y) \rightarrow$ 联合概率 $p_{X,Y}(x, y)$

相反，条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 到联合概率 $p_{X,Y}(x, y)$ 相当于，以边缘概率 $p_Y(y)$ 作为系数缩放 $p_{X|Y}(x|y)$ 的过程：

$$\underbrace{p_{X,Y}(x, y)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_{X|Y}(x|y)}_{\text{Conditional}} \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \quad (60)$$

条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$

同理，给定事件 $\{X = x\}$ 条件下，当 $p_X(x) > 0$ ，事件 $\{Y = y\}$ 发生的概率可以用条件概率质量函数 $p_{Y|X}(y|x)$ 表达：

$$\underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} = \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}}} \quad (61)$$

图 20 展示求解条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 过程。同样，从函数角度来看， $p_{Y|X}(y|x)$ 也是个二元函数。从矩阵运算角度，上式也用到了广播原则，结果 $p_{Y|X}(y|x)$ 同样是个矩阵。

$p_{Y|X}(y|x)$ 对 y 求和等于 1:

$$\sum_y p_{Y|X}(y|x) = 1$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (62)$$

(61) 也可以用来反求联合概率 $p_{Y,X}(y,x)$:

$$\underbrace{p_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \quad (63)$$

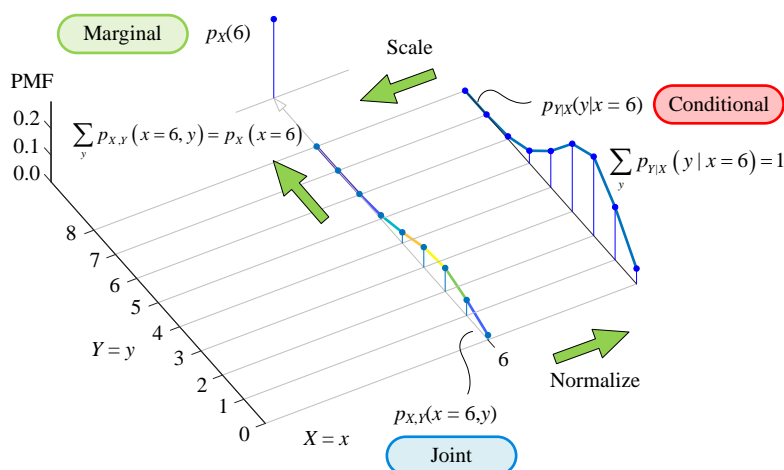


图 20. 求解条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 的过程

同理，边缘概率 $p_Y(y)$ 也是条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 的加权平均：

$$\underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} = \sum_x \underbrace{p_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} = \sum_y \underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \quad (64)$$

上式也是一个“偏求和”过程。

4.8 独立性：条件概率等于边缘概率

独立

如果两个离散变量 X 和 Y 独立，条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 等于边缘概率 $p_X(x)$ ，下式成立：

$$\underbrace{p_{X|Y}(x|y)}_{\text{Conditional}} = \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \quad (65)$$

如图 21 所示， X 和 Y 独立，不管 y 取任何值 ($0 \sim 8$)， $p_X(x)$ 的形状和 $p_{X|Y}(x|y)$ 相同。

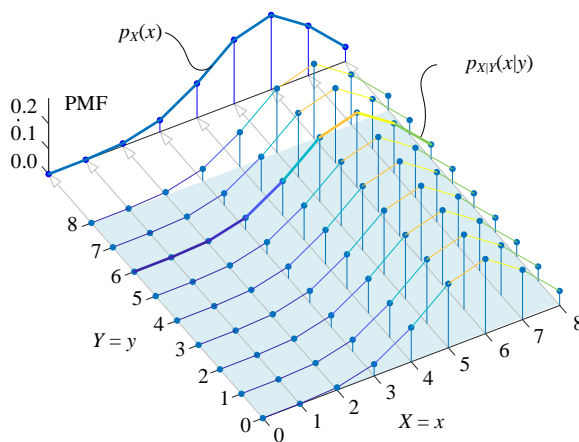


图 21. X 和 Y 独立，条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 等于边缘概率 $p_X(x)$

(65) 等价于下式：

$$\underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} = \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \quad (66)$$

同理，如图 22 所示， X 和 Y 独立时， $p_Y(y)$ 的形状和 $p_{Y|X}(y|x)$ 相同。这恰恰说明， X 的取值和 Y 无关，也就是为什么条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 的形状不受 $X=x$ 影响，都和 $p_Y(y)$ 相同。

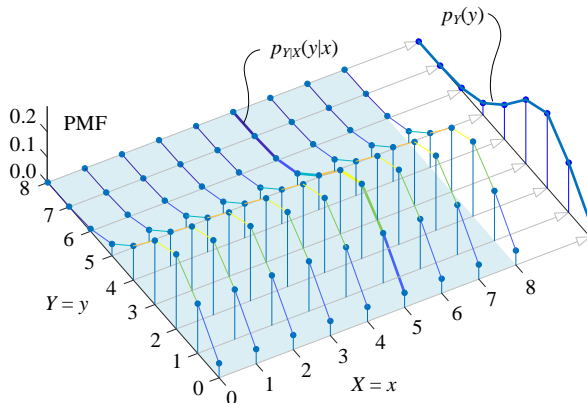
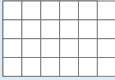




图 22. X 和 Y 独立，条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 等于边缘概率 $p_Y(y)$ **独立：计算联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$**

另外一个角度，如果离散随机变量 X 和 Y 独立，联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 等于 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 两个边缘概率质量函数 PMF 乘积：

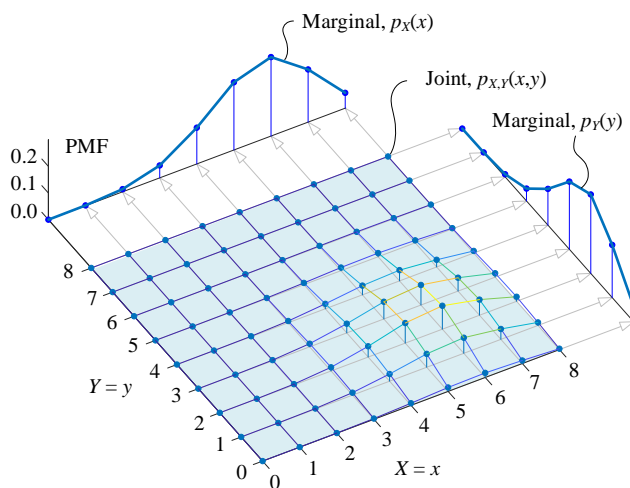




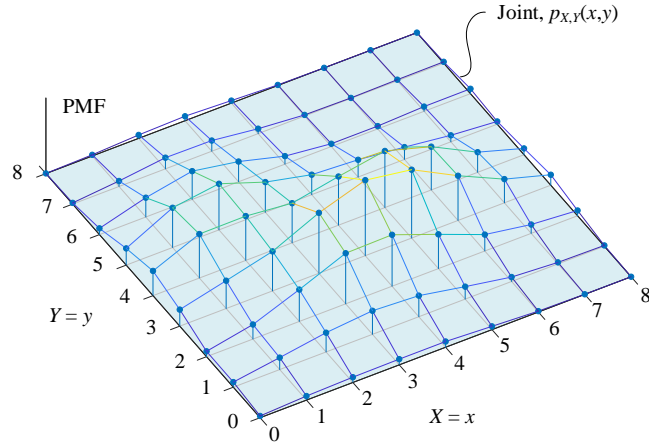


$$\underbrace{p_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \quad (67)$$

从向量角度来看，把 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 看成是两个向量，上式相当于 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 的张量积。

图 23. 联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 等于 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 两个边缘概率乘积**不独立**

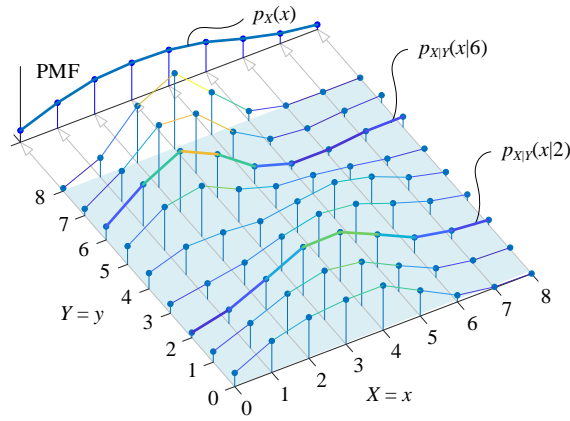
我们再来看一下，在离散随机变量 X 和 Y 不独立的情况下， $p_{Y|X}(y|x)$ 和 $p_Y(y)$ 图像可能存在的某种关系。图 24 给出另一个联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 的图像。

图 24. 离散随机变量 X 和 Y 不独立情况下，联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$

前文已经介绍，如果 X 和 Y 不独立，如果 $p_Y(y) > 0$ ，条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 公式如下：

$$\underbrace{p_{X|Y}(x|y)}_{\text{Conditional}} = \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}}} = \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}}{\sum_x p_{X,Y}(x,y)} \quad (68)$$

如图 25 所示，当 X 和 Y 不独立，条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 不同于边缘概率 $p_X(x)$ 。

图 25. X 和 Y 不独立，条件概率 $p_{X|Y}(x|y)$ 不同于边缘概率 $p_X(x)$

如果 $p_X(x) > 0$ ，条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 需要利用贝叶斯定理计算：

$$\underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} = \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}}} = \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}}{\sum_y p_{X,Y}(x,y)} \quad (69)$$

如图 26 所示, X 和 Y 不独立, 条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 不同于边缘概率 $p_Y(y)$ 。

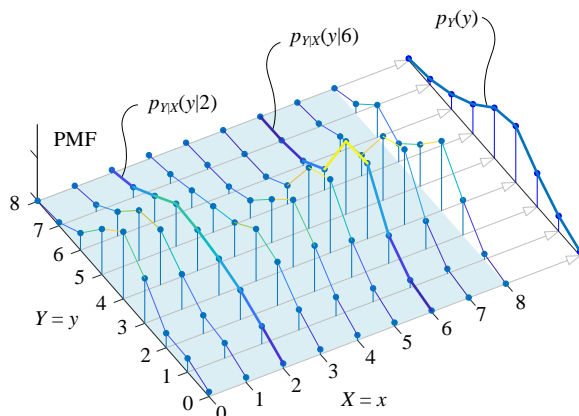


图 26. X 和 Y 不独立, 条件概率 $p_{Y|X}(y|x)$ 不同于边缘概率 $p_Y(y)$

4.9 以鸢尾花数据为例：不考虑分类标签

本章下两节用鸢尾花数据集花萼长度 (X_1)、花萼宽度 (X_2)、分类标签 (Y) 样本数据为例, 讲解离散随机变量主要知识点。

对于鸢尾花数据集, 分类标签 (Y) 本身就是离散随机变量, 因为 Y 的取值只有三个, 对应鸢尾花三个类别——versicolor、setosa、virginica。

而花萼长度 (X_1)、花萼宽度 (X_2) 两者取值都是连续数值, 大家可能好奇, X_1 和 X_2 怎么可能变成离散随机变量?

两把直尺

这里只需要做一个很小的调整, 给定鸢尾花花萼长度或宽度 d , 然后进行 $\text{round}(2 \times d)/2$ 运算。比如, 鸢尾花花萼长度为 5.3, 进行上述计算变成 5.5。

这就好比, 测量鸢尾花获得原始数据时, 用的是图 27 (a) 所示直尺。而我们在测量花萼长度、花萼宽度时, 用的是如图 27 (b) 所示的直尺。直尺精度为 0.5 cm。而测量结果仅保留一位有效小数, 这一位小数的数值可能是 0 或 5。

实际上鸢尾花四个特征的原始数据本身也是“离散的”, 因为原始数据仅仅保留一位有效小数位。只不过我们把数据看成是连续数据而已。从这个角度来看, 在数据科学领域, 电子数据离散、连续与否是相对的。

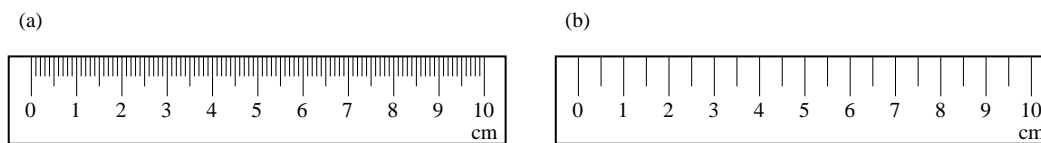


图 27. 两把直尺

“离散”的花萼长度、花萼宽度数据

图 28 所示为经过 $\text{round}(2 \times d)/2$ 运算得到的“离散”的花萼长度、花萼宽度数据散点图。

花萼长度 (X_1) 取值有 8 个，分别是 4.5、5.0、5.5、6.0、6.5、7.0、7.5、8.0。也就是说 X_1 的样本空间为 $\{4.5, 5.0, 5.5, 6.0, 6.5, 7.0, 7.5, 8.0\}$ 。

花萼宽度 (X_2) 取值有 6 个，分别是 2.0、2.5、3.0、3.5、4.0、4.5。 X_2 的样本空间为 $\{2.0, 2.5, 3.0, 3.5, 4.0, 4.5\}$ 。

下一步，我们统计每个散点对应的频数，即散点图中网格线交点处样本数量。

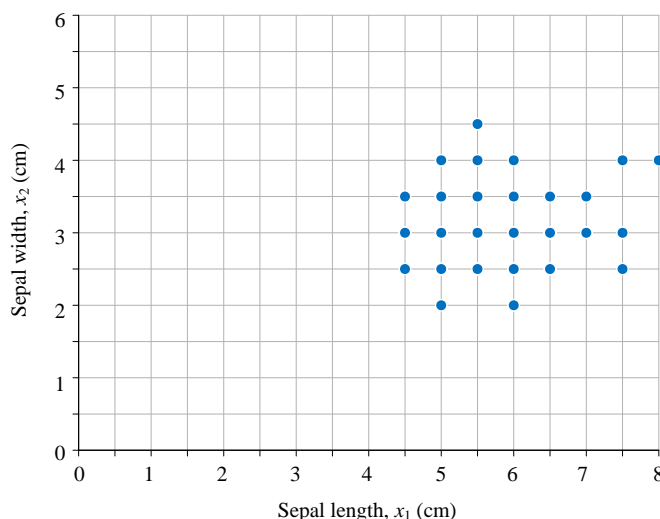


图 28. “离散”的鸢尾花花萼长度、花萼宽度散点图

频数 → 联合概率质量函数 $p_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$

基于图 28 所示数据，我们可以得到图 29 所示频数和概率热图。为了区分频数和概率热图，两类热图采用不同色谱。

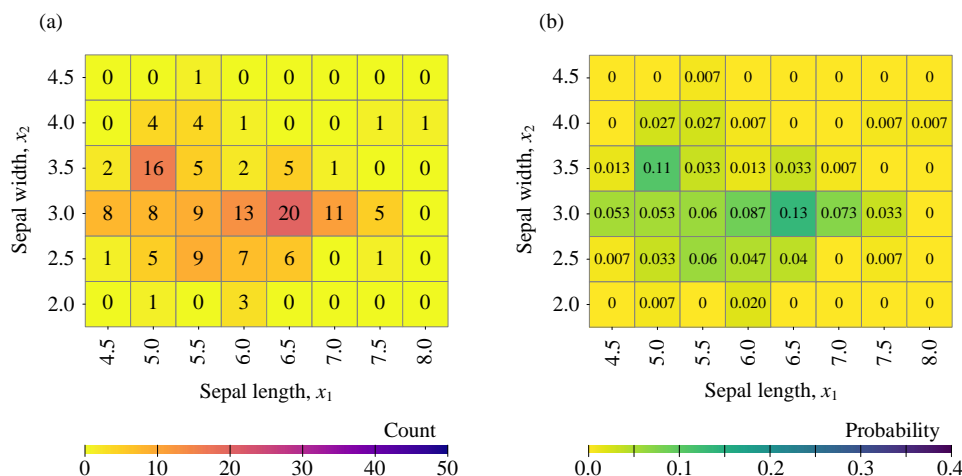


图 29. 频数和概率热图，全部样本点，不考虑分类

图 29 (a) 中频数之和为 150，即鸢尾花样本总数。从频数到概率的计算很简单，比如频数为 3，样本总数为 150，两者比值对应概率 $0.02 = 3/150$ 。

翻译成“概率语言”就是，根据既有样本数据，花萼长度 (X_1) 为 6.0、花萼宽度 (X_2) 为 2.0 对应的联合概率为 0.02：

$$p_{X_1, X_2}(6.0, 2.0) = 0.02 \quad (70)$$

采用穷举法，图 29 (b) 热图中所有取值之和为 1，即：

$$\sum_{x_1} \sum_{x_2} p_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = 1 \quad (71)$$

用样本数来计算的话，上式相当于 $150/150 = 1$ 。也就是说，图 29 (b) 是对概率为 1 的某种特定的分割。

花萼长度边缘概率 $p_{X_1}(x_1)$ ：偏求和

图 30 所示为求解花萼长度边缘概率的过程。

举个例子，当花萼长度 (X_1) 取值为 7.0 时，对应的边缘概率 $p_{X_1}(7.0)$ 可以通过如下“偏求和”得到：

$$p_{X_1}(7.0) = \sum_{x_2} p_{X_1, X_2}(7.0, x_2) = \underset{X_2=2.0}{0} + \underset{X_2=2.5}{0} + \underset{X_2=3.0}{0.073} + \underset{X_2=3.5}{0.007} + \underset{X_2=4.0}{0} + \underset{X_2=4.5}{0} = 0.08 \quad (72)$$

上式相当于，固定花萼长度 (X_1) 为 7.0，然后穷举花萼宽度 (X_2) 所有概率值，然后求和 (压缩、折叠)。

从频数角度来看，上式相当于：

$$p_{X_1}(7.0) = \frac{X_2=2.0 \quad X_2=2.5 \quad X_2=3.0 \quad X_2=3.5 \quad X_2=4.0 \quad X_2=4.5}{0 \quad + \quad 0 \quad + \quad 11 \quad + \quad 1 \quad + \quad 0 \quad + \quad 0} = \frac{12}{150} = 0.08 \quad (73)$$

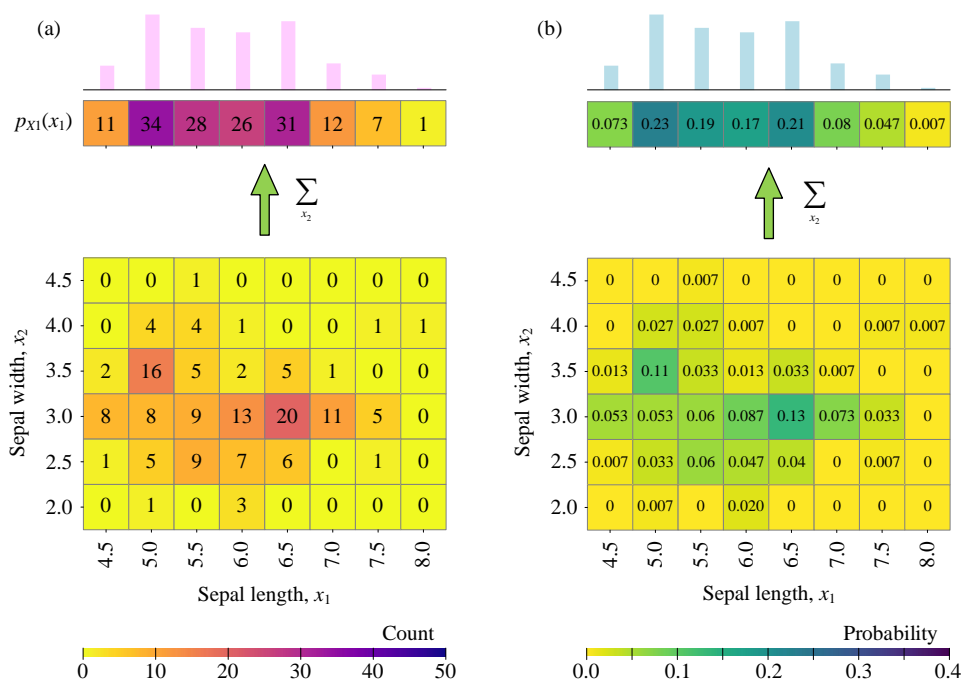


图 30. 花萼长度的边缘频数和概率热图，不考虑分类

花萼宽度边缘概率 $p_{X_2}(x_2)$ ：偏求和

图 31 所示为求解花萼宽度边缘概率的过程。

举个例子，当花萼宽度 (X_2) 取值为 2.0 时，对应的边缘概率 $p_{X_2}(2.0)$ 可以通过如下偏求和得到：

$$p_{X_2}(2.0) = \sum_{x_1} p_{X_1, X_2}(x_1, 2.0) = \underset{X_1=4.5}{0} + \underset{X_1=5.0}{0.007} + \underset{X_1=5.5}{0} + \underset{X_1=6.0}{0.02} + \underset{X_1=6.5}{0} + \underset{X_1=7.0}{0} + \underset{X_1=7.5}{0} + \underset{X_1=8.0}{0} = 0.027 \quad (74)$$

上式相当于，固定花萼宽度 (X_2) 为 2.0，然后穷举花萼长度 (X_1) 所有概率值，然后求和。

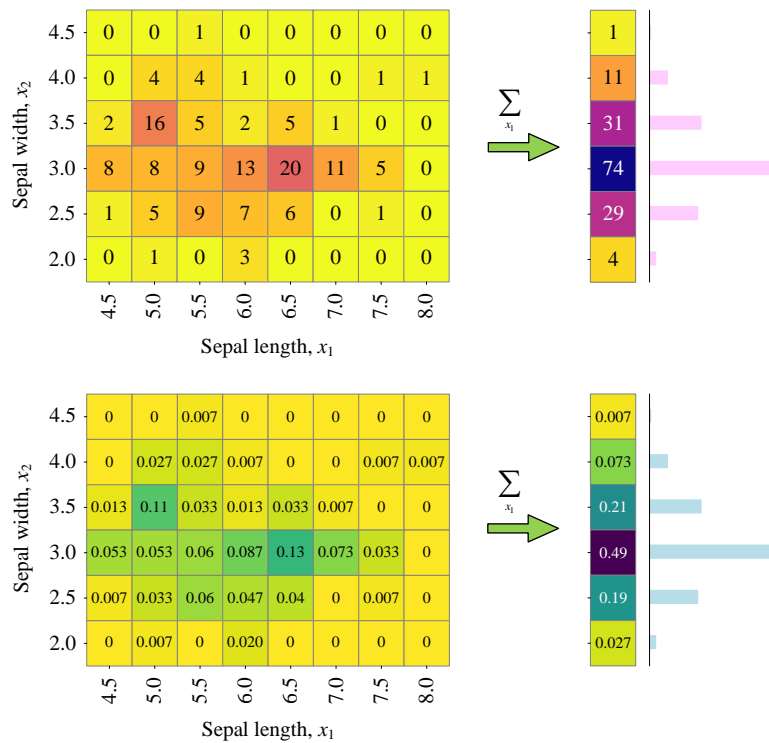


图 31. 花萼宽度的边缘频数和概率热图，不考虑分类

期望值、方差

花萼长度 X_1 的期望值：

$$\begin{aligned}
 E(X_1) &= \sum_{x_1} x_1 \cdot p_{X_1}(x_1) \\
 &= 4.5 \times 0.073 + 5.0 \times 0.23 + 5.5 \times 0.19 + 6.0 \times 0.17 + \\
 &\quad 6.5 \times 0.21 + 7.0 \times 0.08 + 7.5 \times 0.047 + 8.0 \times 0.007 \\
 &= 5.836 \text{ cm}
 \end{aligned} \tag{75}$$

请大家自行写出上式对应的矩阵运算式，并画出矩阵乘法运算示意图。

然后，计算花萼长度 X_1 平方的期望值：

$$\begin{aligned}
 E(X_1^2) &= \sum_{x_1} x_1^2 \cdot p_{X_1}(x_1) \\
 &= 4.5^2 \times 0.073 + 5.0^2 \times 0.23 + 5.5^2 \times 0.19 + 6.0^2 \times 0.17 + \\
 &\quad 6.5^2 \times 0.21 + 7.0^2 \times 0.08 + 7.5^2 \times 0.047 + 8.0^2 \times 0.007 \\
 &= 34.741 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{76}$$

由此可以求得花萼长度 X_1 的方差：

$$\text{var}(X_1) = \underbrace{E(X_1^2)}_{\text{Expectaton of } X^2} - \underbrace{E(X_1)^2}_{\text{Square of } E(X_1)} = 0.6749 \quad (77)$$

结果的单位为平方厘米， cm^2 。

▲ 注意，上式把数据当做总体的样本数据来看。

(77) 的平方根便是 X_1 的标准差：

$$\sigma_{X_1} = \sqrt{\text{var}(X_1)} = 0.821 \text{ cm} \quad (78)$$

请大家自行计算：花萼宽度 X_2 的期望值、 X_2 平方期望值。由此，可以求得花萼宽度 X_2 的方差，然后计算 X_2 的标准差。

独立

前文提过，如果假设 X_1 和 X_2 独立，联合概率可通过下式计算得到：

$$p_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = p_{X_1}(x_1) \cdot p_{X_2}(x_2) \quad (79)$$

图 32 所示为，假设 X_1 和 X_2 独立，联合概率的热图。

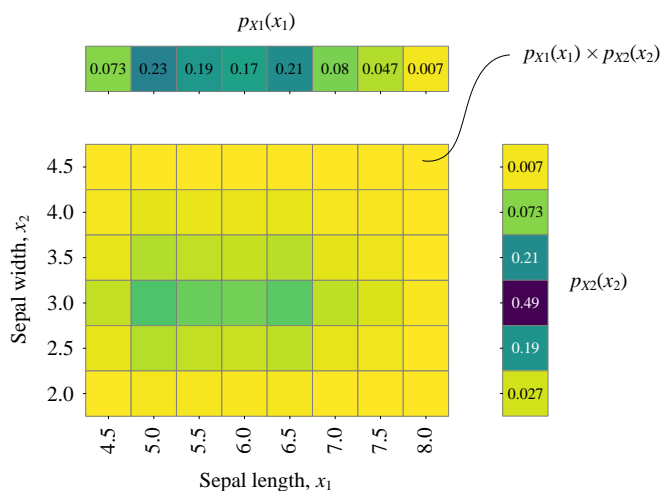
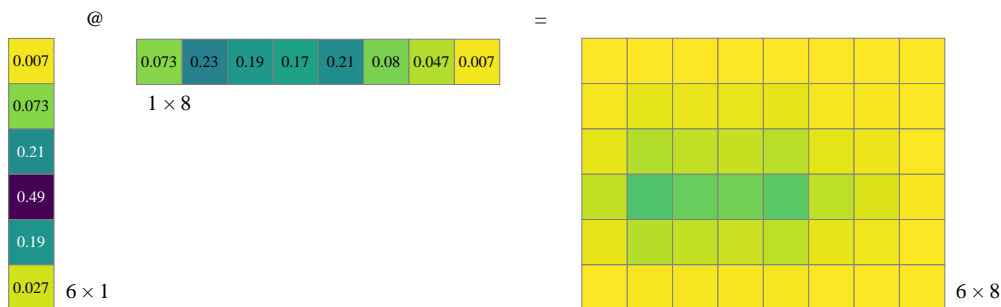


图 32. 联合概率，假设独立

这实际上就是《矩阵力量》介绍的向量张量积，也相当于如图 33 所示的矩阵乘法。



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

图 33. X_1 和 X_2 条件独立，矩阵乘法

图 32 中矩阵所有元素之和也是 1。追根溯源，这体现的是乘法的分配律：

$$\underbrace{\sum_{x_1} p_{X_1}(x_1)}_{=1} \cdot \underbrace{\sum_{x_2} p_{X_2}(x_2)}_{=1} = 1 \quad (80)$$

为了配合热图形式，用如下方式展开上式：

$$\underbrace{\{p_{X_2}(4.5) + p_{X_2}(4.0) + \dots + p_{X_2}(2.0)\}}_{=1} \cdot \underbrace{\{p_{X_1}(4.5) + p_{X_1}(5.0) + \dots + p_{X_1}(8.0)\}}_{=1} = 1 \quad (81)$$

展开的每一个元素对应热图矩阵的每个元素：

$$\begin{aligned} & p_{X_2}(4.5) \cdot p_{X_1}(4.5) + p_{X_2}(4.5) \cdot p_{X_1}(5.0) + \dots + p_{X_2}(4.5) \cdot p_{X_1}(8.0) + \\ & p_{X_2}(4.0) \cdot p_{X_1}(4.5) + p_{X_2}(4.0) \cdot p_{X_1}(5.0) + \dots + p_{X_2}(4.0) \cdot p_{X_1}(8.0) + \\ & \dots + \\ & p_{X_2}(2.0) \cdot p_{X_1}(4.5) + p_{X_2}(2.0) \cdot p_{X_1}(5.0) + \dots + p_{X_2}(2.0) \cdot p_{X_1}(8.0) = 1 \end{aligned} \quad (82)$$

比较图 32 和图 29 (b)，我们发现假设 X_1 和 X_2 独立得到的联合概率和真实值偏差很大。也就是说，(79) 这种假设随机变量独立然后计算联合概率的方法很多时候并不准确，需要谨慎。

给定花萼长度，花萼宽度的条件概率 $p_{X_2|X_1}(x_2|x_1)$

如图 34 所示，给定花萼长度 $X_1 = 5.0$ 作为条件，这相当于在整个样本空间中，单独划出一个区域。这个区域将是“条件概率样本空间”，对应图 34 中的浅蓝色背景区域。计算 $X_1 = 5.0$ 条件概率时，将浅蓝色区域的概率值设为 1。

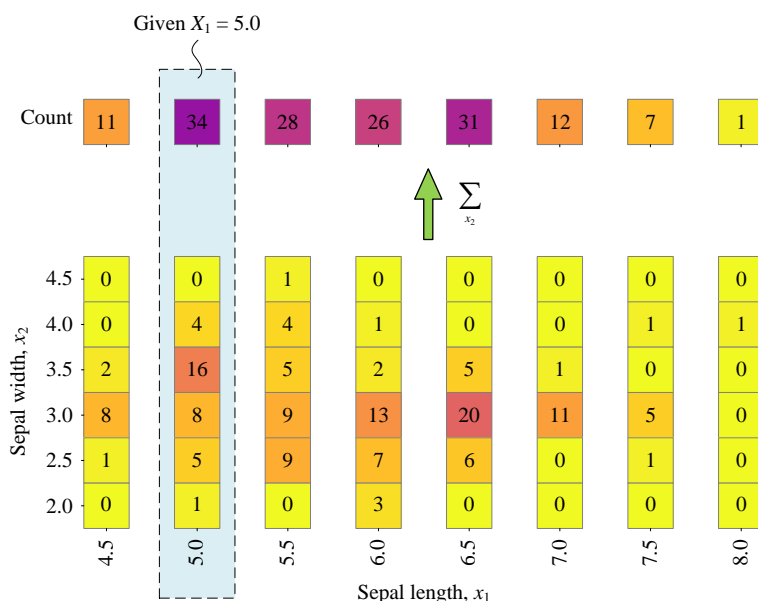


图 34. 频数视角，给定花萼长度，如何计算花萼宽度的条件概率

采用穷举法，这个区域中的条件概率有如下几个：

$$\begin{aligned}
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 4.5 | x_1 = 5.0) &= \frac{0}{34} = 0 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 4.0 | x_1 = 5.0) &= \frac{4}{34} \approx 0.12 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 3.5 | x_1 = 5.0) &= \frac{16}{34} \approx 0.47 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 3.0 | x_1 = 5.0) &= \frac{8}{34} \approx 0.24 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 2.5 | x_1 = 5.0) &= \frac{5}{34} \approx 0.15 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 2.0 | x_1 = 5.0) &= \frac{1}{34} \approx 0.029
 \end{aligned} \tag{83}$$

换个方法来求。如图 35 所示，利用贝叶斯定理，(83) 中条件概率可以通过下式计算：

$$\begin{aligned}
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 4.5 | x_1 = 5.0) &= \frac{p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 4.5)}{p_{X_1}(x_1 = 5.0)} \approx \frac{0}{0.23} = 0 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 4.0 | x_1 = 5.0) &= \frac{p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 4.0)}{p_{X_1}(x_1 = 5.0)} \approx \frac{0.027}{0.23} \approx 0.12 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 3.5 | x_1 = 5.0) &= \frac{p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 3.5)}{p_{X_1}(x_1 = 5.0)} \approx \frac{0.11}{0.23} \approx 0.47 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 3.0 | x_1 = 5.0) &= \frac{p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 3.0)}{p_{X_1}(x_1 = 5.0)} \approx \frac{0.053}{0.23} \approx 0.24 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 2.5 | x_1 = 5.0) &= \frac{p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 2.5)}{p_{X_1}(x_1 = 5.0)} \approx \frac{0.033}{0.23} \approx 0.15 \\
 p_{X_2|X_1}(x_2 = 2.0 | x_1 = 5.0) &= \frac{p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 2.0)}{p_{X_1}(x_1 = 5.0)} \approx \frac{0.007}{0.23} \approx 0.029
 \end{aligned} \tag{84}$$

其中，

$$\begin{aligned}
 p_{X_1}(x_1 = 5.0) &= p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 4.5) + p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 4.0) + \\
 &\quad p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 3.5) + p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 3.0) + \\
 &\quad p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 2.5) + p_{X_1, X_2}(x_1 = 5.0, x_2 = 2.0) \\
 &\approx 0 + 0.027 + 0.11 + 0.053 + 0.033 + 0.007 \approx 0.23
 \end{aligned} \tag{85}$$

比较 (83) 和 (84)，发现结果相同。

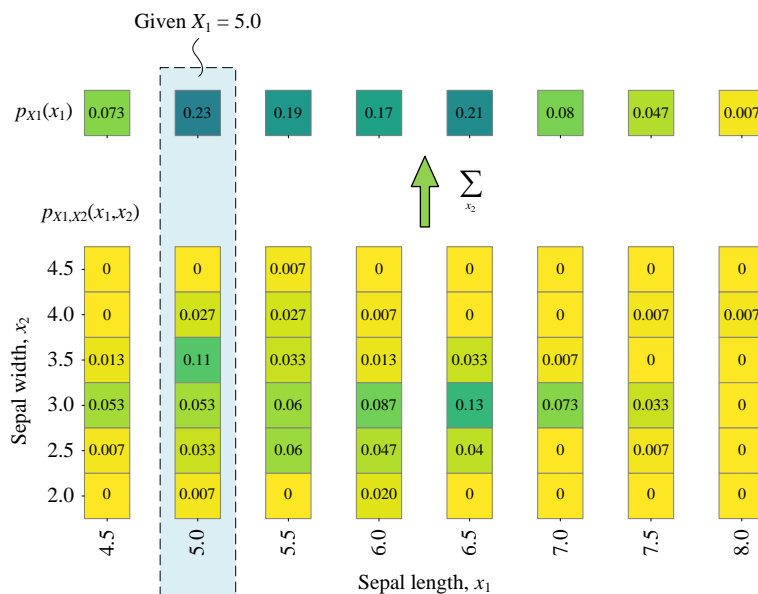
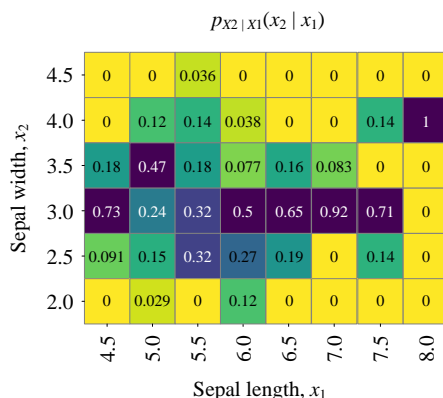


图 35. 概率视角，给定花萼长度，如何计算花萼宽度的条件概率

本章前文提过，从函数角度来看， $p_{X_2|X_1}(x_2|x_1)$ 本质上也是个二元离散函数，具体如图 36 所示。

图 36. 给定花萼长度，花萼宽度的条件概率 $p_{X_2|X_1}(x_2|x_1)$

如图 37 所示，每一列条件概率求和为 1：

$$\sum_{x_2} p_{X_2|X_1}(x_2|x_1) = 1 \quad (86)$$

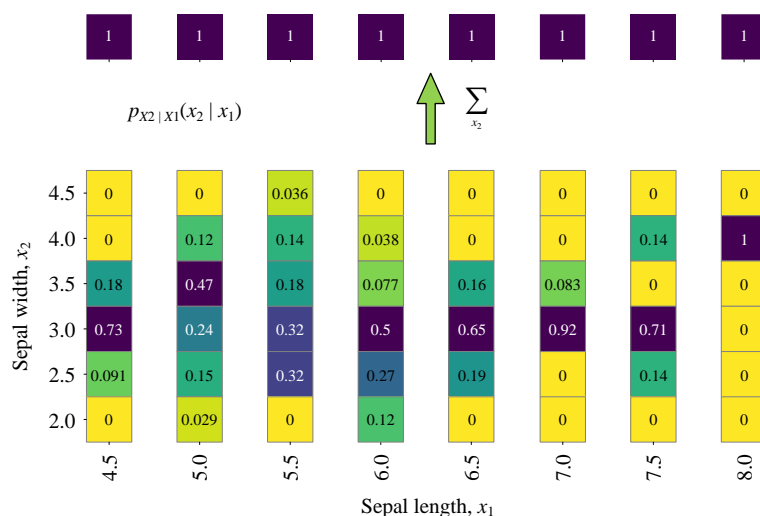


图 37. 给定花萼长度，花萼宽度的条件概率，每一列条件概率求和为 1

给定花萼宽度，花萼长度的条件概率 $p_{X1|X2}(x1 | x2)$

根据图 38 数据，请大家自行计算，给定花萼宽度为 3.0，每个条件概率 $p_{X1|X2}(x1 | 3.0)$ 的具体值。

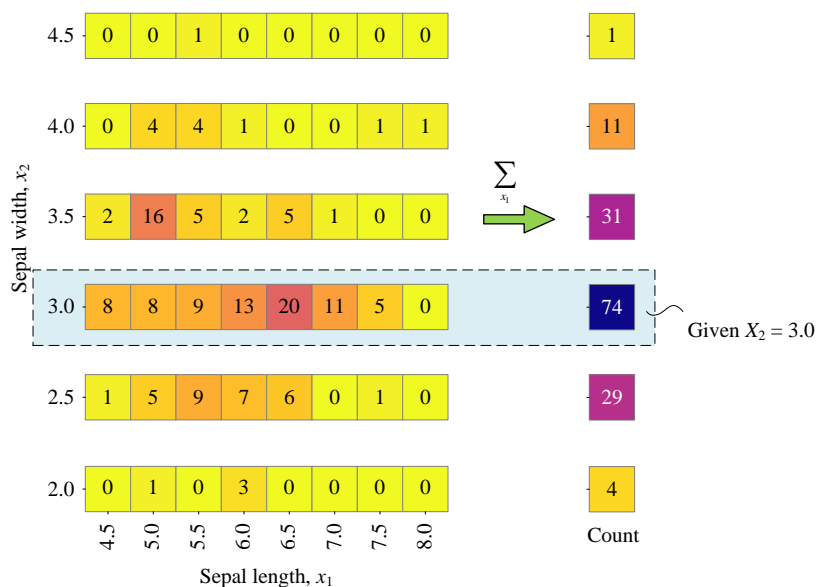


图 38. 频数视角，给定花萼宽度，如何计算花萼长度的条件概率

从函数角度来看， $p_{X1|X2}(x1 | x2)$ 也是个二元离散函数，具体如图 39 所示。

大家是否立刻想到，既然我们可以求得花萼长度的期望值，我们是否可以求得给定花萼宽度条件下的花萼长度的期望、方差？

答案是肯定的！

本书第 8 章将专门介绍**条件期望** (conditional expectation)、**条件方差** (conditional variance)。

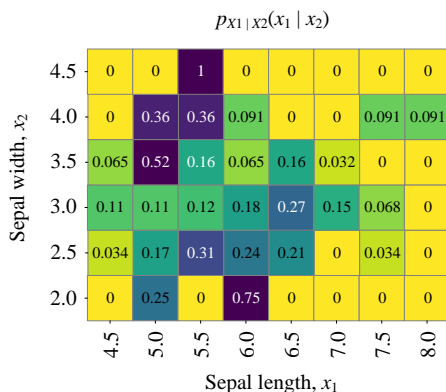


图 39. 给定花萼宽度，花萼长度的条件概率 $p_{X1|X2}(x1 | x2)$

如图 40 所示，每一行条件概率求和为 1：

$$\sum_{x_1} p_{X1|X2}(x1 | x2) = 1 \quad (87)$$

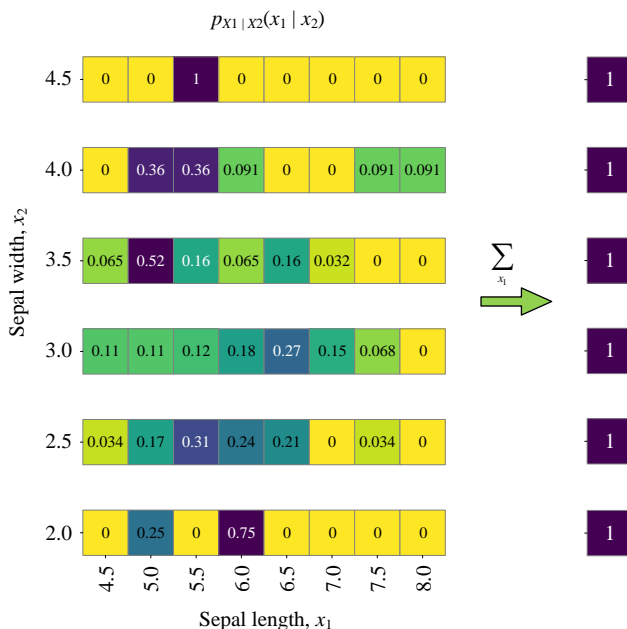


图 40. 给定花萼宽度，花萼长度的条件概率每一行条件概率求和为 1

4.10 以鸢尾花数据为例：考虑分类标签

本节讨论在考虑分类标签条件下，如何计算鸢尾花数据的条件概率。

给定分类标签 $Y = C_1$ (setosa)

图 41 (a) 所示为给定分类标签 $Y = C_1$ (setosa) 条件下，鸢尾花数据集中 50 个样本数据的频数热图。图 41 中频数除以 50 便得到图 41 (b) 所示条件概率 $p_{X_1, X_2 | Y}(x_1, x_2 | y = C_1)$ 热图。

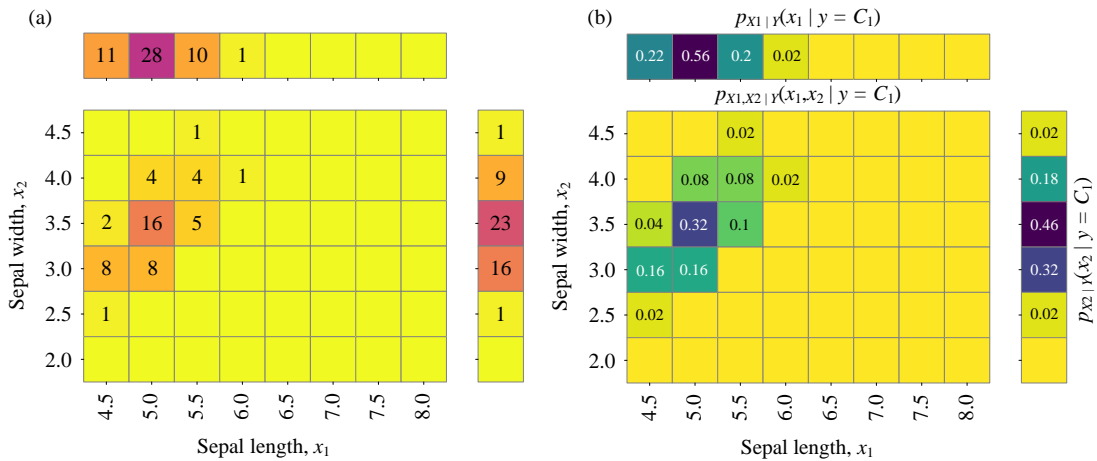


图 41. 频数和条件概率 $p_{X_1, X_2 | Y}(x_1, x_2 | y = C_1)$ 热图，给定分类标签 $Y = C_1$ (setosa)

此外，请大家根据频数热图，自行计算两个条件概率： $p_{X_1 | X_2, Y}(x_1 = 5.0 | x_2 = 3.0, y = C_1)$ 和 $p_{X_2 | X_1, Y}(x_2 = 3.0 | x_1 = 5.0, y = C_1)$ 。

给定分类标签 $Y = C_2$ (versicolor)

图 42 (a) 所示为给定分类标签 $Y = C_2$ (versicolor) 条件下，鸢尾花数据集中 50 个样本数据的频数热图。图 42 中频数除以 50 便得到图 42 (b) 所示条件概率 $p_{X_1, X_2 | Y}(x_1, x_2 | y = C_2)$ 热图。

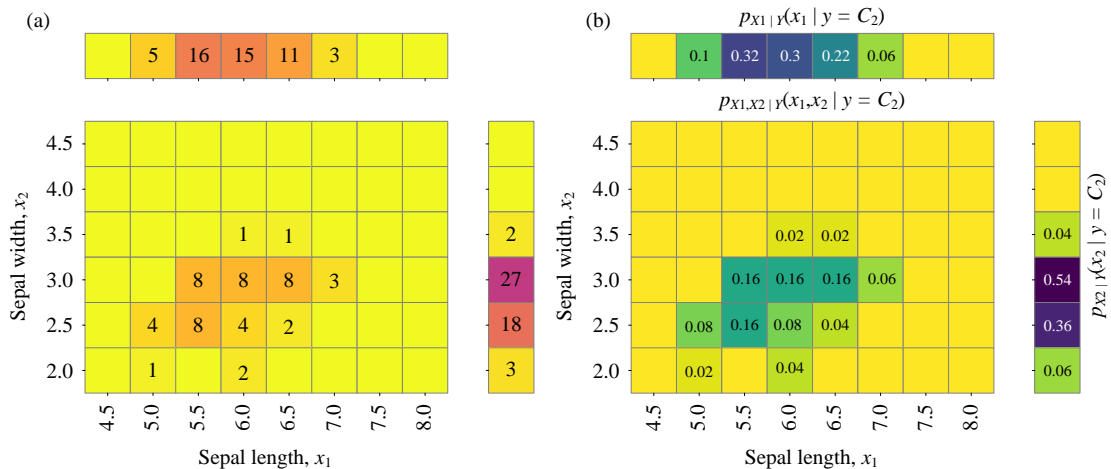


图 42. 频数和条件概率 $p_{X_1, X_2 | Y}(x_1, x_2 | y = C_2)$ 热图，给定分类标签 $Y = C_2$ (versicolor)

给定分类标签 $Y = C_3$ (virginica)

请大家自行分析图 43。

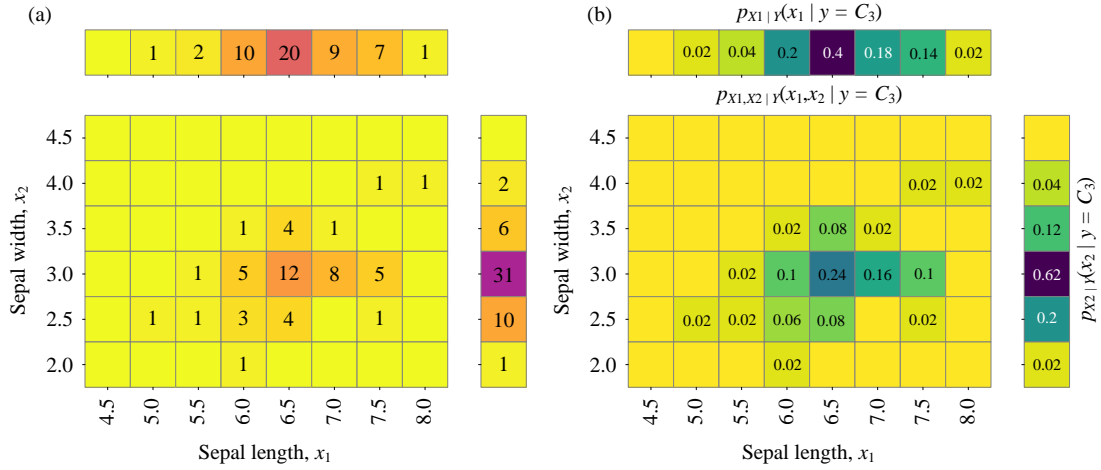


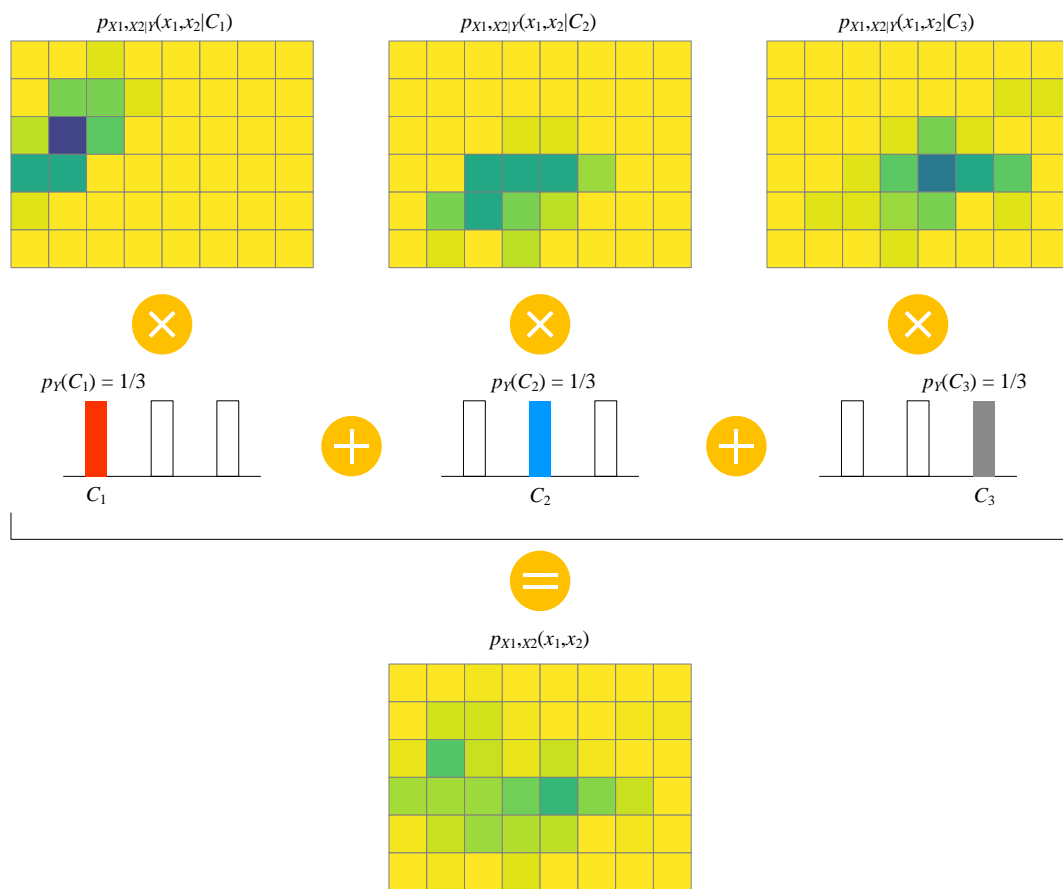
图 43. 频数和条件概率 $p_{X1, X2 | Y}(x_1, x_2 | y = C_3)$ 热图，给定分类标签 $Y = C_3$ (virginica)

全概率

如图 44 所示，利用全概率定理，我们可以通过下式计算 $p_{X1, X2}(x_1, x_2)$ ：

$$\begin{aligned}
 p_{X1, X2}(x_1, x_2) &= \sum_y \underbrace{p_{X1, X2, Y}(x_1, x_2, y)}_{\text{Joint}} \\
 &= \sum_y \underbrace{p_{X1, X2 | Y}(x_1, x_2 | y)}_{\text{Conditional}} \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \\
 &= p_{X1, X2 | Y}(x_1, x_2 | C_1) \cdot p_Y(C_1) + \\
 &\quad p_{X1, X2 | Y}(x_1, x_2 | C_2) \cdot p_Y(C_2) + \\
 &\quad p_{X1, X2 | Y}(x_1, x_2 | C_3) \cdot p_Y(C_3)
 \end{aligned} \tag{88}$$

从几何角度来看，联合概率质量函数 $p_{X1, X2}(x_1, x_2, y)$ 相当于一个“立方体”。上式相当于，将立方体在 Y 方向上压扁成 $p_{X1, X2}(x_1, x_2)$ 平面。本章最后将继续这一话题。

图 44. 利用全概率定理，计算 $p_{X1,X2}(x1, x2)$

条件独立

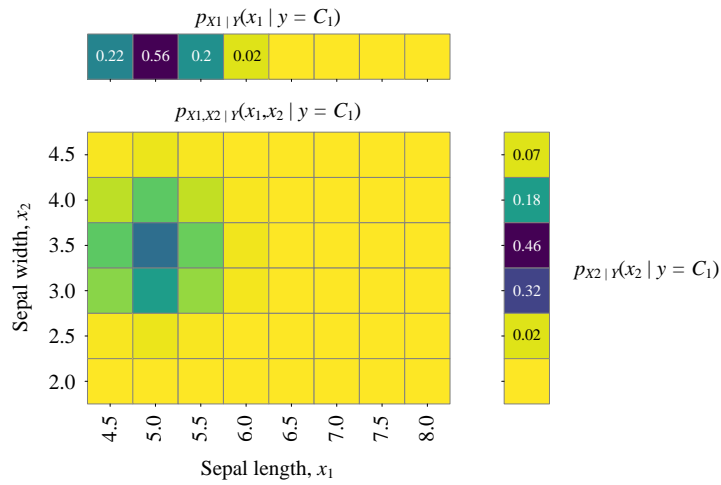
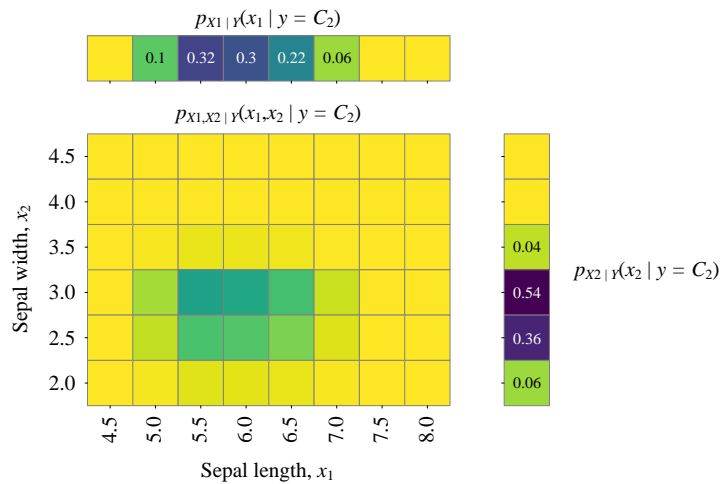
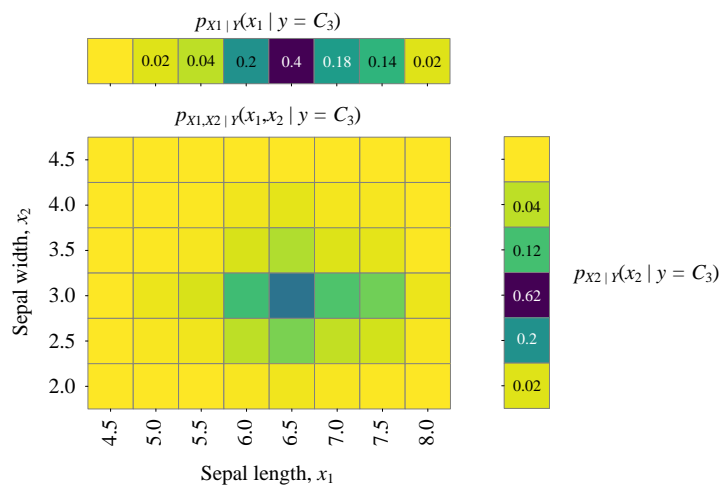
图 45 所示为给定 $Y = C_1$ 条件下，假设 X_1 和 X_2 条件独立，利用 $p_{X1|Y}(x1|y = C1)$ 、 $p_{X2|Y}(x2|y = C1)$ 估算 $p_{X1,X2|Y}(x1,x2|y = C1)$ ：

$$p_{X1,X2|Y}(x1,x2|C1) = p_{X1|Y}(x1|C1)p_{X2|Y}(x2|C1) \quad (89)$$

图 45 也相当于两个向量的张量积，请大家画出矩阵运算示意图。

请大家自行从矩阵乘法角度分析图 46、图 47。

将这些条件概率质量函数代入 (88)，我们也可以计算得到另外一个 $p_{X1,X2}(x1, x2)$ 。这实际上是估算 $p_{X1,X2}(x1, x2)$ 的一种方法。本书后续还会介绍这种方法及其应用。

图 45. 给定 $Y = C_1$, 假设 X_1 和 X_2 条件独立, 计算 $p_{X_1,X_2|Y}(x_1,x_2 | y = C_1)$ 图 46. 给定 $Y = C_2$, 假设 X_1 和 X_2 条件独立, 计算 $p_{X_1,X_2|Y}(x_1,x_2 | y = C_2)$ 图 47. 给定 $Y = C_3$, 假设 X_1 和 X_2 条件独立, 计算 $p_{X_1,X_2|Y}(x_1,x_2 | y = C_3)$



代码 Bk5_Ch04_02.py 绘制前两节大部分图像。

4.10 再谈概率 1: 展开、折叠

偏求和：压扁

本章前文提到，几何上， $p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3)$ 可以视作一个三维立方体。而偏求和是个降维过程，把立方体在不同维度上压扁。

如图 48 所示， $p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3)$ 在 x_1 上偏求和，压扁得到 $p_{X2,X3}(x_2, x_3)$ ：

$$p_{X2,X3}(x_2, x_3) = \sum_{x_1} p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3) \quad (90)$$

如图 48 所示， $p_{X2,X3}(x_2, x_3)$ 代表一个二维平面，相当于一个矩阵。

而 $p_{X2,X3}(x_2, x_3)$ 进一步沿着 x_2 折叠便得到边缘概率质量函数 $p_{X3}(x_3)$ ：

$$\begin{aligned} p_{X3}(x_3) &= \sum_{x_2} p_{X2,X3}(x_2, x_3) \\ &= \sum_{x_2} \sum_{x_1} p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3) \end{aligned} \quad (91)$$

而 $p_{X3}(x_3)$ 相当于一个向量。

沿着哪个方向求和，就相当于完成了这个维度上数据的合并。这个维度因此便消失。

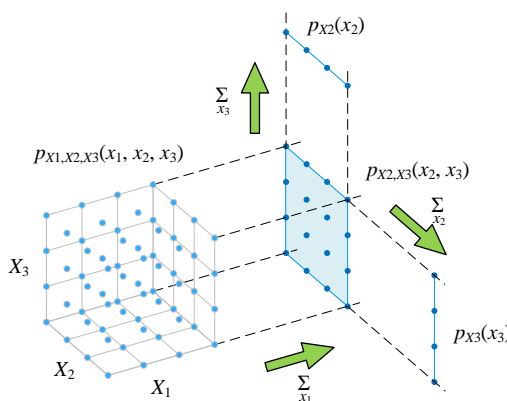


图 48. 先沿 X_1 方向压扁

换个方向， $p_{X2,X3}(x_2, x_3)$ 沿着 x_3 折叠便得到边缘概率质量函数 $p_{X2}(x_2)$ ：

$$p_{X2}(x_2) = \sum_{x_3} p_{X2,X3}(x_2, x_3) \quad (92)$$

而 $p_{X3}(x_3)$ 和 $p_{X2}(x_2)$ 进一步折叠，便获得概率 1：

$$1 = \sum_{x_3} \sum_{x_2} \sum_{x_1} p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{x_2} \sum_{x_3} \sum_{x_1} p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3) \quad (93)$$

经过上述不同顺序的三重求和后，三个维度全部消失，结果是样本空间对应的概率值“1”。

请大家沿着上述思路自行分析图 49 两幅图，并写出求和公式。

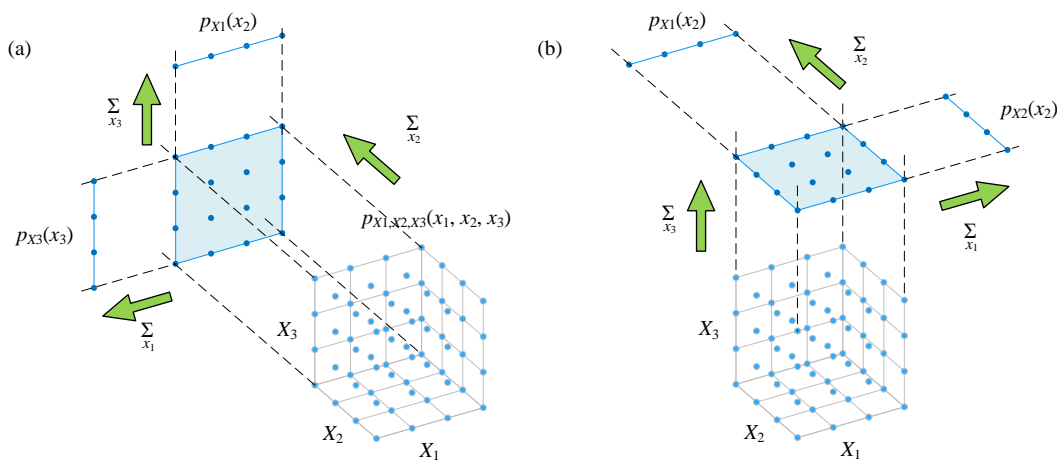


图 49. 分别先沿 X_2 、 X_3 方向压扁

此外，请大家自己思考，如果 X_1 、 X_2 、 X_3 独立，如何计算 $p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3)$ ？

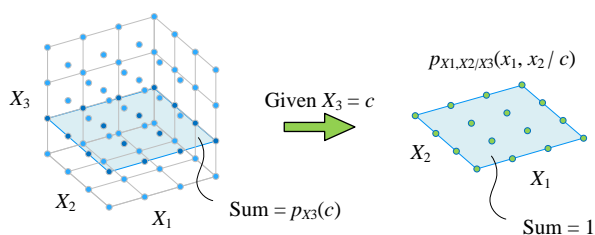
本节 X_1 、 X_2 、 X_3 均为离散随机变量，因此图 48 中每个点均代表概率值。请大家思考以下几种随机变量组合，图 48 这个立方体展开、折叠的方式有何变化？

- ▶ X_1 、 X_2 、 X_3 均为连续随机变量；
- ▶ X_1 、 X_2 为连续随机变量， X_3 为离散随机变量；
- ▶ X_1 、 X_2 为离散随机变量， X_3 为连续随机变量。

条件概率：切片

如图 50 所示，条件概率 $p_{X1,X2|X3}(x_1, x_2 | c)$ 相当于在 $X_3 = c$ 处切了一片，只考虑切片上的概率分布情况，而不考虑整个立方体的概率分布。

也就是说， $X_3 = c$ 对应的切片是条件概率 $p_{X1,X2|X3}(x_1, x_2 | c)$ 的样本空间。

图 50. 给定 $X_3 = c$ 条件概率

计算条件概率时，首先将切片上的联合概率求和得到 $p_{X3}(c)$ ：

$$p_{X3}(c) = \sum_{x_2} \sum_{x_1} p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, c) \quad (94)$$

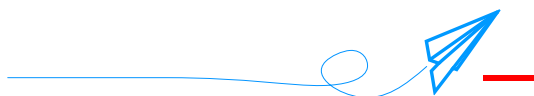
然后，用联合概率除以 $p_{X3}(c)$ 得到条件概率 $p_{X1,X2|X3}(x_1, x_2 | c)$ ：

$$p_{X1,X2|X3}(x_1, x_2 | c) = \frac{p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, c)}{p_{X3}(c)} \quad (95)$$

大家自己思考，如果给定 $X_3 = c$ 条件下， X_1 和 X_2 条件独立，意味着什么？



本书第 8 章将继续这个话题。



本章和大家主要探讨了离散随机变量。离散随机变量是指一种在有限或可数的取值集合中随机取值的随机变量。例如，掷硬币的结果只有两个可能的取值：正面或反面，用 0 或 1 来表示。离散随机变量通常用概率质量函数 PMF 来描述其可能取值的概率。对于二元、多元离散随机变量，大家要学会如何计算边缘概率、条件概率。本章最后的鸢尾花例子全面地复盘了有关离散随机变量的关键知识点，请大家务必弄懂。

下一章将介绍离散随机变量中常见分布。