自然语言处理

第3讲：数学基础

刘洋

内容提要

AI
NLP

- 微积分
- 概率论
- 线性代数
- 信息论

函数

设数集$D \subset \mathbb{R}$，则称映射$f: D \to \mathbb{R}$为定义在D上的函数，通常记为

$$y = f(x), x \in D$$

其中x称为自变量，y称为因变量，D称为定义域，记作D_f，即$D_f = D$。

对于每个$x \in D$，按对应法则f，总有唯一的值y与之相对应，这个值称为函数f在x处的函数值，记作$f(x)$，即$y = f(x)$。函数值$f(x)$的全体所构成的集合称为函数f的值域，记作R_f或$f(D)$，即

$$R_f = f(D) = \{y \mid y = f(x), x \in D\}$$

例如，$f(x) = 3x + 2$是一个函数，定义域是$\mathbb{R}$，值域是$\mathbb{R}$，自变量和因变量之间存在一一映射。表示函数的记号可以任意选取，除了常用的f以外，还可以用其他的英文字母或希腊字母，如g、F和ϕ。

复合函数

给定两个函数f和g，复合函数定义为

$$(f \circ g)(x) = f(g(x))$$

两个函数f和g能构成复合函数$f \circ g$的条件是：函数g的值域R_g必须是函数f的定义域D_f的子集，即$\boxed{R_g \subseteq D_f}$。

例如，$y = f(u) = 3u + 2$的定义域为$\mathbb{R}$，而$u = g(x) = x^2 - 2$的定义域为$\mathbb{R}$。由于$g(\mathbb{R}) \subseteq \mathbb{R}$，因此$f$和$g$可以构成复合函数

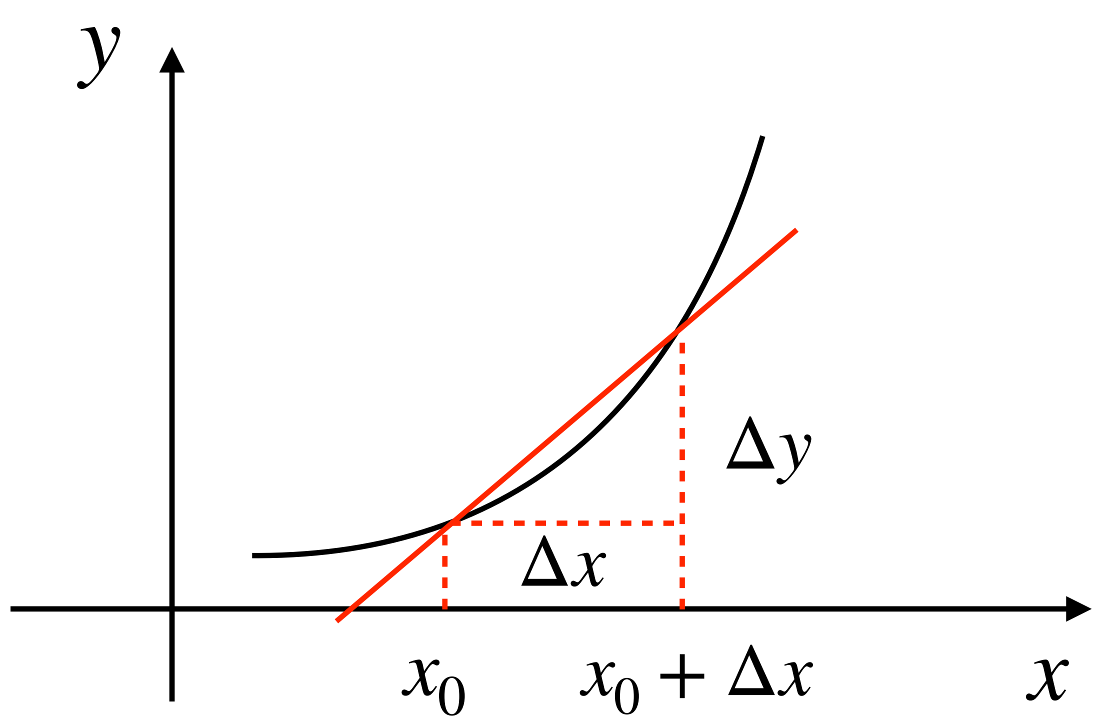
$$(f \circ g)(x) = 3(x^2 - 2) + 2 = 3x^2 - 4$$

另一个例子是$y = f(u) = \sqrt{u}$，而$u = g(x) = x - 2$，由于函数g的值域为$\mathbb{R}$，而函数f的定义域是$\{u \mid u \geq 0\}$，不满足内层函数值域是外层函数定义域子集的约束条件，所以无法构成复合函数。

导数

设函数$y=f(x)$在点x_0的某个邻域内有定义，当自变量x在x_0处有增量Δx，而且$x_0+\Delta x$也在该邻域内时，函数取得增量$\Delta y=f(x_0+\Delta x)-f(x_0)$。如果$\Delta y$与$\Delta x$之比当$\Delta x\to 0$时极限存在，则称函数$y=f(x)$在点$x_0$处可导，并称这个极限为函数$y=f(x)$在点$x_0$处的导数，记作

$$f'(x_0)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x}$$



导函数

如果函数$y=f(x)$在开区间内每一点都可导，则称函数$f(x)$在区间内可导。这时函数$y=f(x)$对于区间内的每一个确定的x值，都对应着一个确定的导数值，这就构成一个新的函数。我们将该函数称之为原来函数的导函数，记作y'、$f'(x)$或$\mathrm{d}f(x)/\mathrm{d}x$，简称导数。

名称	函数	导函数
常函数	$f(x)=C$	$f'(x)=0$
幂函数	$f(x)=x^n$	$f'(x)=nx^{n-1}$
对数函数	$f(x)=a^x$	$f'(x)=a^x\ln a$
对数函数	$f(x)=\log_a x$	$f'(x)=1/(x\ln a)$
正弦函数	$f(x)=\sin x$	$f'(x)=\cos x$
余弦函数	$f(x)=\cos x$	$f'(x)=-\sin x$

导数的四则运算

对于可导函数f和g，导数的四则运算规则如下：

加法：$(f+g)' = f' + g'$

减法：$(f-g)' = f' - g'$

乘法：$(fg)' = f'g + fg'$

除法：$(f/g)' = (f'g - fg')/g^2$

例如，令$f(x) = x^2$，$g(x) = x$，则$f'(x) = 2x$，$g'(x) = 1$。四则运算如下：

1. $f(x) + g(x) = x^2 + x$的导函数是$2x + 1$。

2. $f(x) - g(x) = x^2 - x$的导函数是$2x - 1$。

3. $f(x)g(x) = x^3$的导函数是$2x \times x + x^2 \times 1 = 3x^2$。

4. $f(x)/g(x) = x$的导函数是$(2x \times x - x^2 \times 1)/(x \times x) = 1$。

复合函数的导数

对于复合函数$(f \circ g)(x)$，通常使用链式法则计算其导数：

$$(f \circ g)'(x) = f'(g(x))g'(x)$$

令$u = g(x)$，则链式法则的另一种表述方式为

$$\frac{\mathrm{d}f(g(x))}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}f(u)}{\mathrm{d}u} \times \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}$$

例如，令$f(u) = u^2$，$u = g(x) = x + 1$，则$f'(u) = 2u$，$g'(x) = 1$。直接复合函数可以得到$(f \circ g)(x) = (x+1)^2$，直接求导得到$(f \circ g)'(x) = 2(x+1)$，使用链式法则的结果是$2 \times (x+1) \times 1 = 2(x+1)$，因此验证了链式法则的正确性。

链式法则对于计算复合函数的导数而言非常重要，因此在神经网络等使用复合函数的计算模型中具有广泛的应用。

二阶导数

一般而言，函数$y = f(x)$的导数$y' = f'(x)$仍然是x的函数，可以进一步求导。二阶导数是原函数导数的导数，即对原函数进行二次求导，记作

$$y'' = (y')'$$

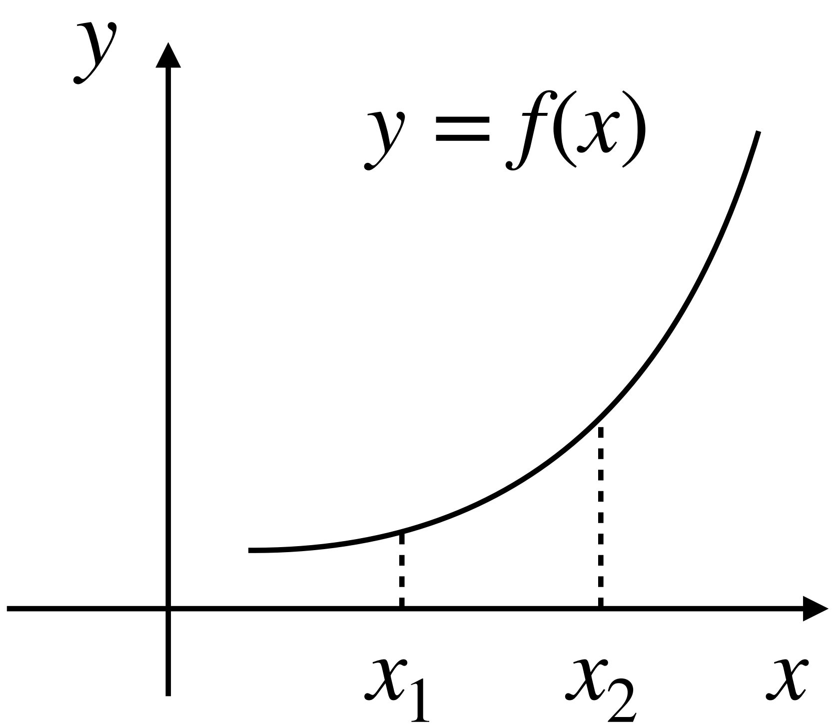
二阶导数的另一种常见的表示方法为

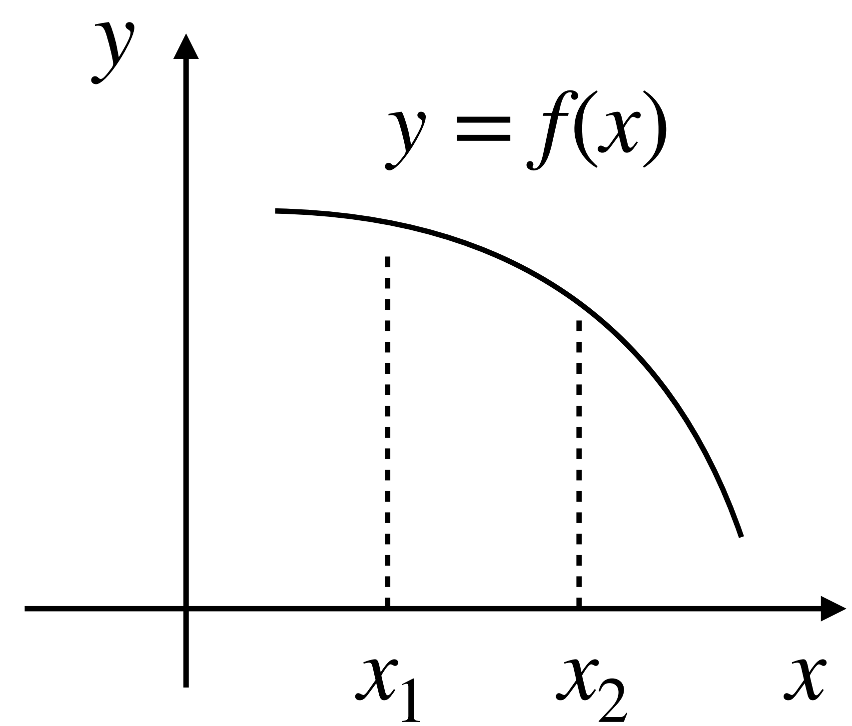
$$y'' = \frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2}$$

例如，$y = x^2$的一阶导数为$y' = 2x$，而二阶导数则是一阶导数$y' = 2x$的导数$y'' = 2$。

二阶导数反映了一阶导数的变化率。我们通常使用二阶导数来判断函数的凹凸性并计算极值。类似地，在条件允许的情况下，还可以计算函数的三阶导数、四阶导数或高阶导数。

函数的单调性

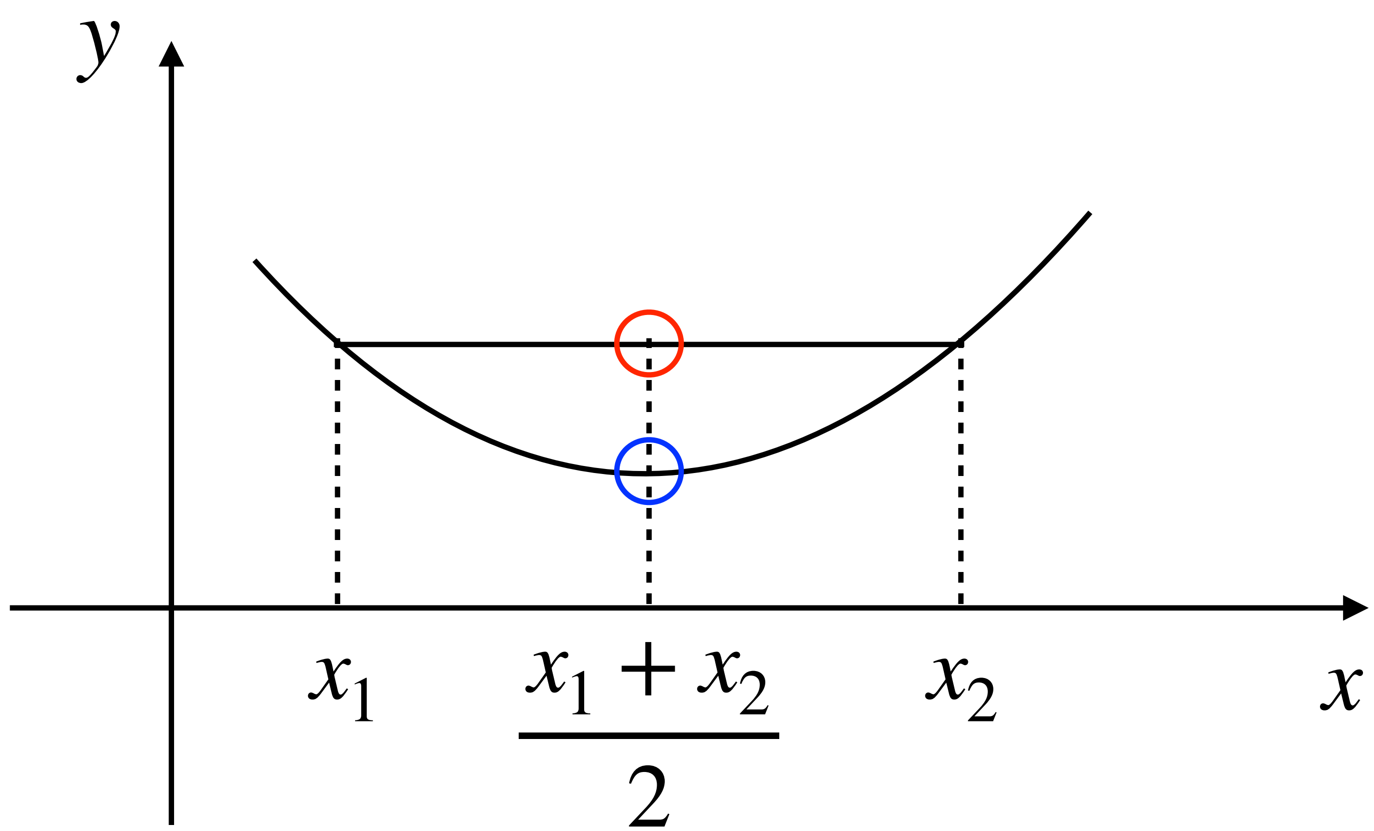




设函数$f(x)$的定义域为D，区间$I \subset D$。如果对于区间I上任意两点x_1和x_2，当$x_1 < x_2$时，恒有$f(x_1) < f(x_2)$，则称函数$f(x)$在区间I上单调递增。

反之，如果对于区间I上任意两点x_1和x_2，当$x_1 < x_2$时，恒有$f(x_1) > f(x_2)$，则称函数$f(x)$在区间I上单调递减。

凹函数



$$\frac{f(x_1)+f(x_2)}{2}$$

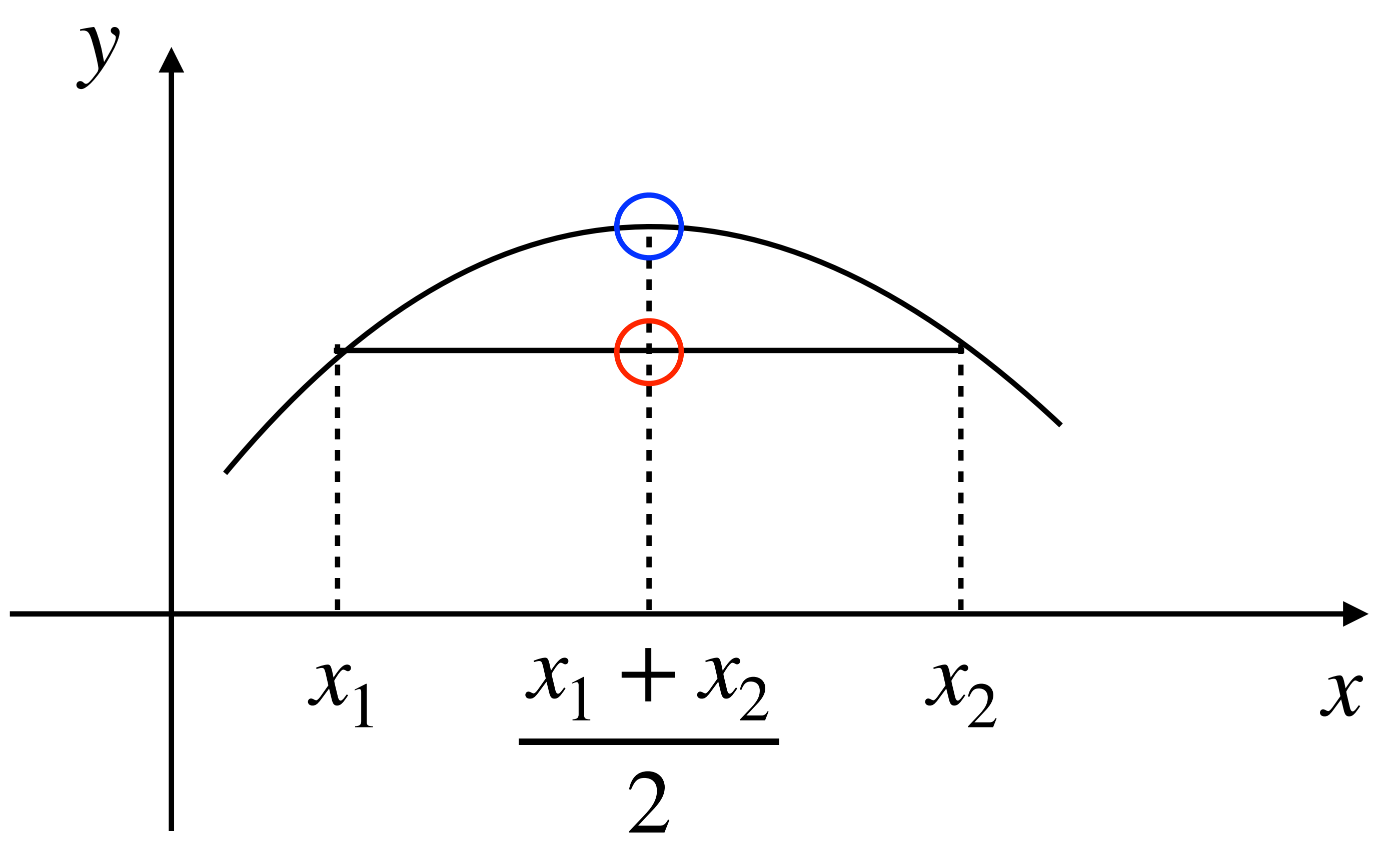
$$f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right)$$

给定函数$f:\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{R}$，对于任意两个点$x_1$和$x_2$，如果满足下列条件

$$f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right)\leq\frac{f(x_1)+f(x_2)}{2}$$

则称$f(x)$是一个凹函数。

凸函数



$$\frac{f(x_1)+f(x_2)}{2}$$

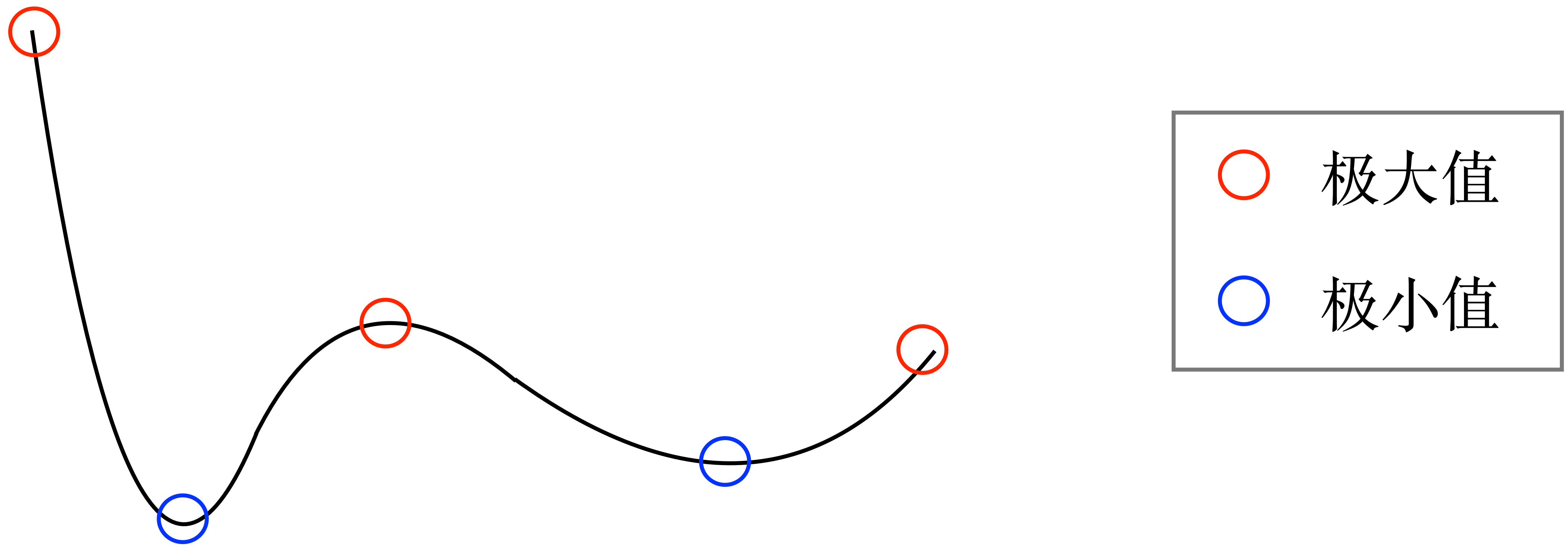
$$f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right)$$

给定函数$f:\mathbb{R}\rightarrow\mathbb{R}$，对于任意两个点$x_1$和$x_2$，如果满足下列条件

$$f\left(\frac{x_1+x_2}{2}\right)\geq\frac{f(x_1)+f(x_2)}{2}$$

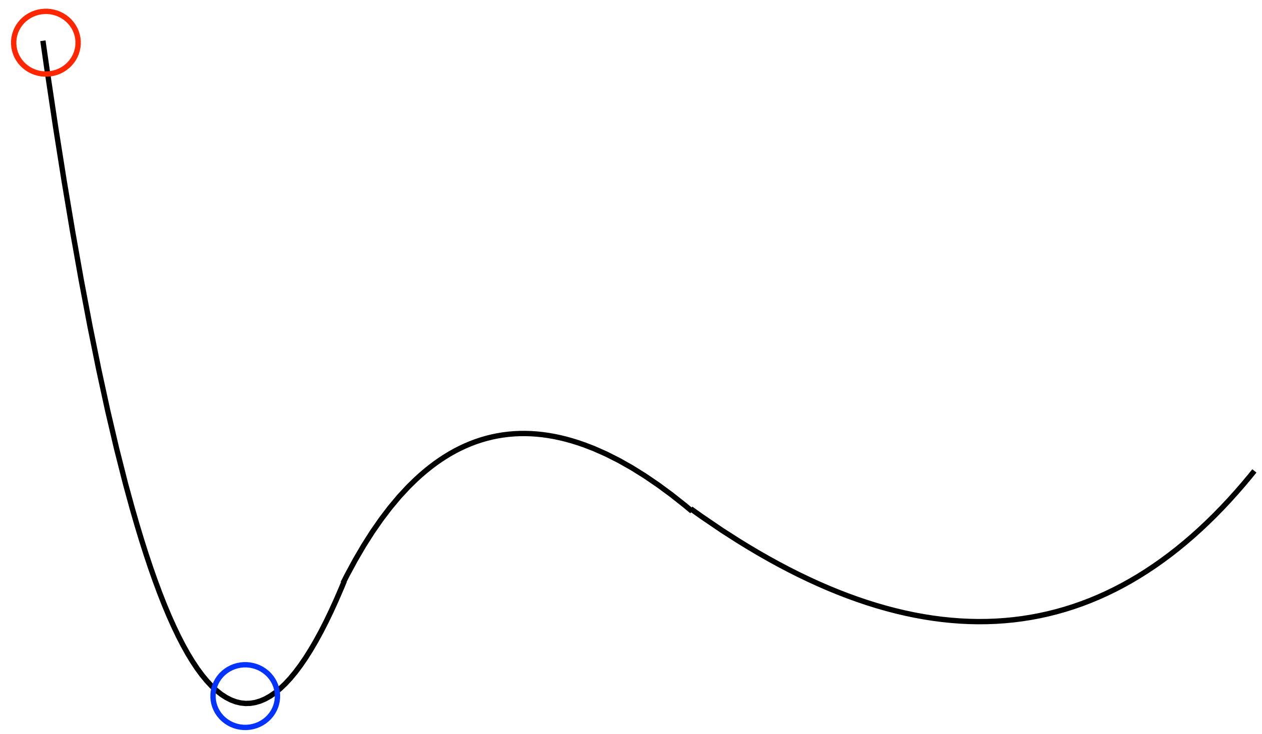
则称$f(x)$是一个凸函数。

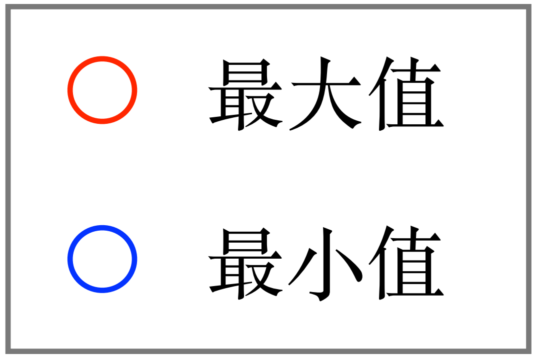
函数的极值



设函数$f(x)$在点$x = x_0$及其附近有定义。如果对于x_0附近的所有点都有$f(x) < f(x_0)$，则$f(x_0)$是函数$f(x)$的一个极大值，x_0是函数$f(x)$的一个极大值点。如果对于x_0附近的所有点都有$f(x) > f(x_0)$，则$f(x_0)$是函数$f(x)$的一个极小值，x_0是函数$f(x)$的一个极小值点。

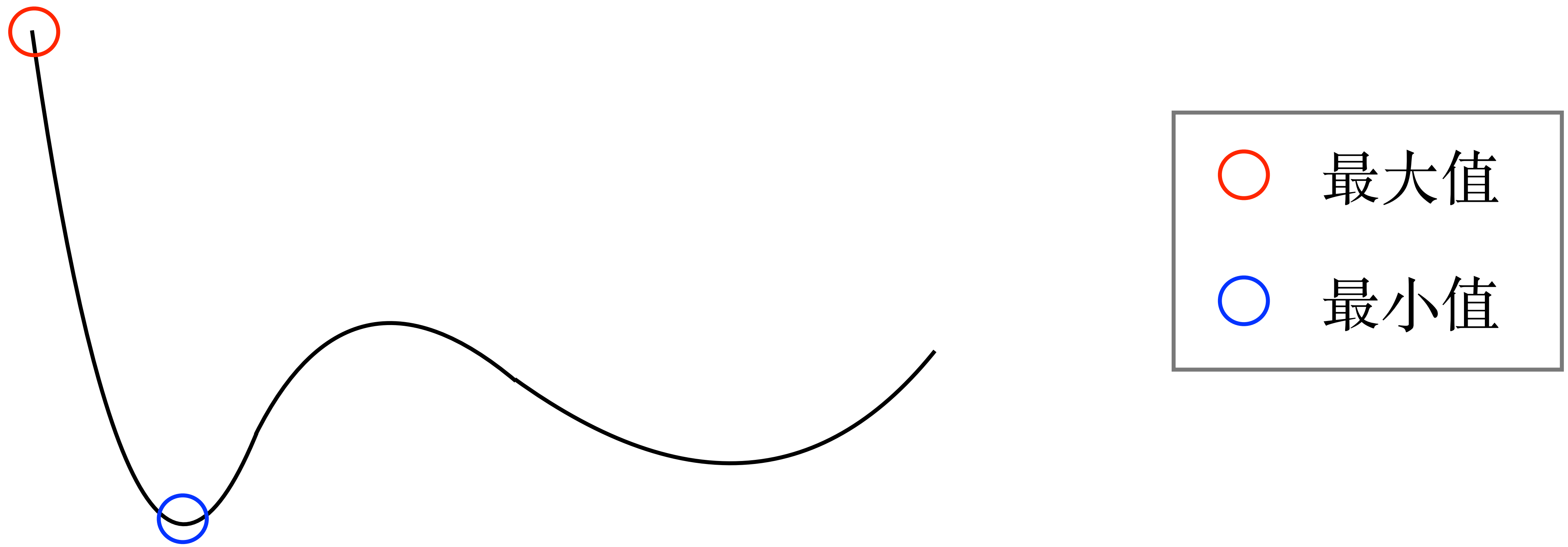
函数的最值





函数在整个定义域内可能有许多极大值或极小值，而且某个极大值不一定大于某个极小值。函数$f(x)$在整个定义域内的最小函数值$f(x_0)$称为函数$f(x)$的最小值，x_0称为最小值点。类似地，函数$f(x)$在整个定义域内的最大函数值$f(x_0)$称为函数$f(x)$的最大值，x_0称为最大值点。

函数的最小值和最大值定理



如果函数$f(x)$在闭区间$[a,b]$上连续，则$f(x)$在$[a,b]$上必有最大值和最小值。在开区间(a,b)上连续的函数$f(x)$不一定有最大值和最小值，如函数$f(x) = 1/x$。函数的最值点必在函数的极值点或者区间的端点处获得。函数的极值可能有多个，但是最值最多只有一个。

计算函数的最值

如果函数$f(x)$在闭区间$[a, b]$上有定义，在开区间(a, b)内有导数，则求函数$f(x)$在闭区间$[a, b]$上的最大值和最小值的步骤如下：

① 求函数$f(x)$在开区间(a, b)的导数$f'(x)$；

② 求方程$f'(x) = 0$在(a, b)内的解；

③ 求在(a, b)内使$f'(x) = 0$的所有点的函数值和$f(x)$在闭区间端点处的函数值$f(a)$和$f(b)$；

④ 比较上面所求的所有值，其中最大值为函数$f(x)$在闭区间$[a, b]$上的最大值，最小值为函数$f(x)$在闭区间$[a, b]$上的最小值。

例如，可以使用上述方法计算函数$f(x) = x^2 - 2x + 1$在区间$[-2,2]$上的最大值和最小值，得到函数的最小值点是1，最大值点是-2。

不定积分

函数$f(x)$的不定积分是一个导数等于$f(x)$的函数F，即$F'(x) = f(x)$。相应地，函数$F(x)$称为$f(x)$的原函数。一个函数通常有多个原函数。例如，函数$f(x) = 2x$的原函数可以是$F(x) = x^2 + 1$，也可以是$F(x) = x^2 + 2$。因此，我们通常将原函数写成以下的形式：

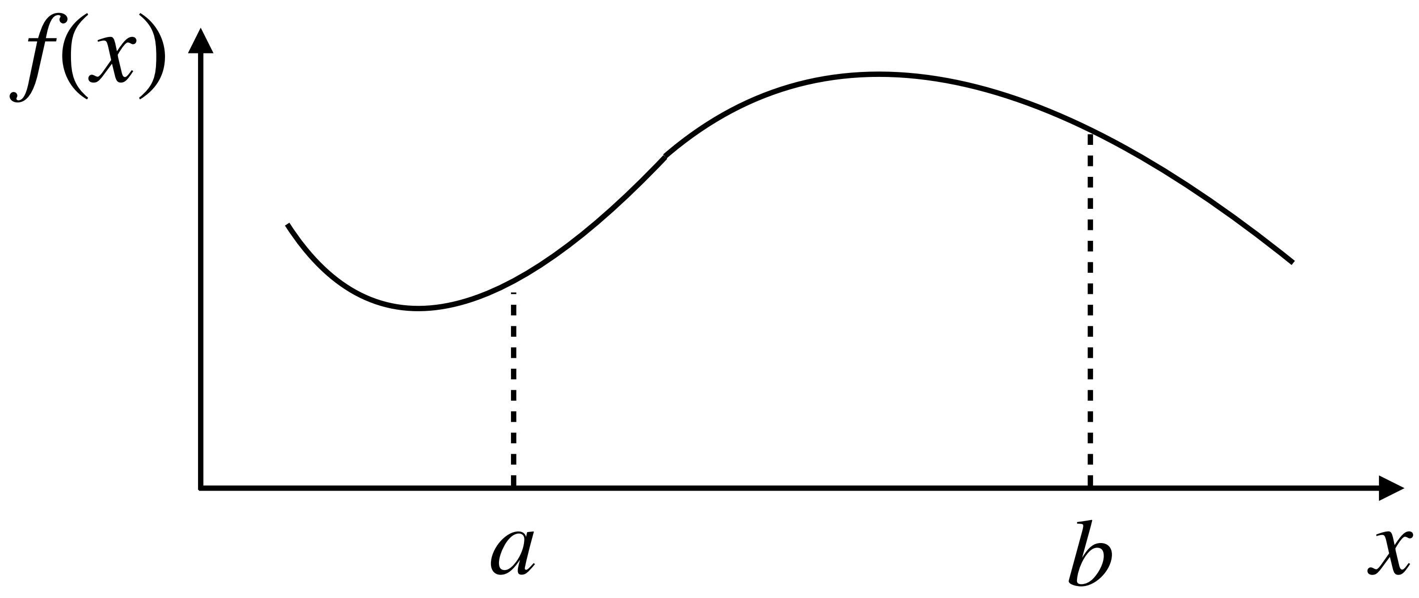
$$\int f(x)\mathrm{d}x = F(x) + C$$

其中，C表示任意常数。常见的积分公式如下：

$$\int a\mathrm{d}x = ax + C \qquad \int x^a\mathrm{d}x = x^{a+1}/(a+1) + C$$

$$\int e^x\mathrm{d}x = e^x + C \qquad \int \sin x\mathrm{d}x = -\cos x + C$$

定积分

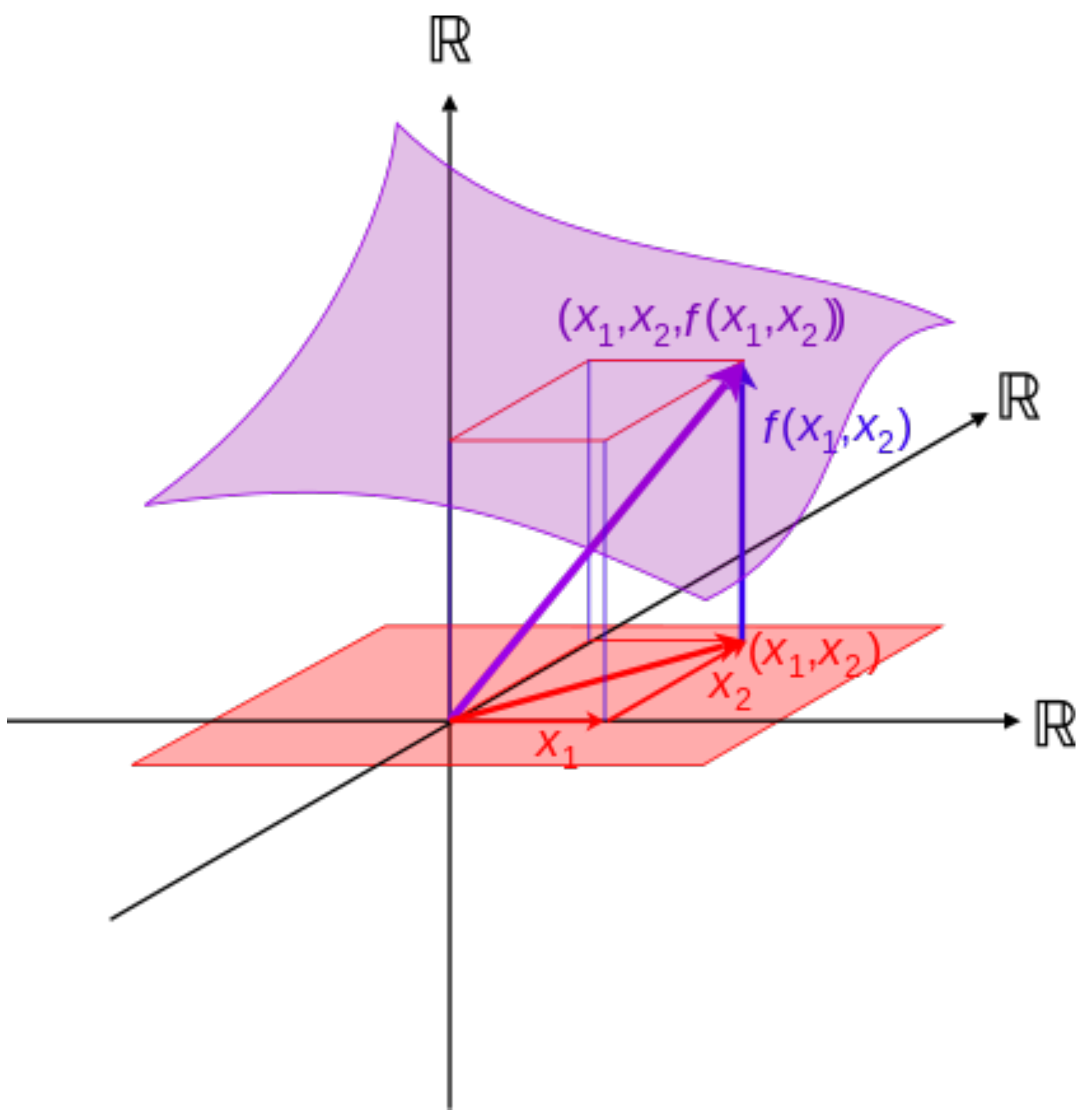


设函数$f(x)$在区间$[a,b]$上连续，将区间$[a,b]$分成n个长度相等的子区间，则函数$f(x)$在区间$[a,b]$上的定积分定义为

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \lim_{n\to+\infty}\sum_{i=1}^{n} f\left(a+\frac{i}{n}(b-a)\right)\frac{b-a}{n}$$

其中，a称为积分下限，b称为积分上限，$[a,b]$称为积分区间，x称为积分变量，$f(x)$称为被积函数。从直观上理解，定积分计算的是包围区域的面积。

多元函数



图片来源：https://en.wikipedia.org/wiki/Function_of_several_real_variables

设D是一个非空的n元有序数组的集合，f为某一确定的对应法则，如果对于每一个有限数组$(x_1, x_2, \ldots, x_n) \in D$，通过对应法则$f$，都有唯一确定的实数$y$与之对应，则称对应法则$f$为定义在$D$上的多元函数，记为

$$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$$

其中$x_1, x_2, \ldots, x_n$称为自变量，y称为因变量。

偏导数

设函数$z=f(x,y)$在点(x_0,y_0)的某一邻域内有定义，当y固定在y_0而x在x_0处有增量Δx时，相应地函数值有增量$f(x_0+\Delta x,y_0)-f(x_0,y_0)$。如果极限

$$\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x_0+\Delta x,y_0)-f(x_0,y_0)}{\Delta x}$$

存在，则称此极限为函数$z=f(x,y)$在点(x_0,y_0)处对x的偏导数，记为

$$\left.\frac{\partial z}{\partial x}\right|_{x=x_0,y=y_0}=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x_0+\Delta x,y_0)-f(x_0,y_0)}{\Delta x}$$

另一种形式是$f_x(x_0,y_0)$。同理可以定义函数在点(x_0,y_0)处对y的偏导数。如果函数$z=f(x,y)$在区域D内任意一点(x,y)处对x的偏导数都存在，那么这个偏导数是x和y的函数，成为函数$z=f(x,y)$对自变量x的偏导数，记为$\partial z/\partial x$。

多元函数求导

设$f(x, y) = x^2 + 3xy + y - 1$，求该函数对$x$和$y$的偏导在点$(4, -5)$处的取值。求解方法如下。首先计算函数对$x$的偏导。在计算过程中，我们可以将$y$看作常量，然后对$x$求导：

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}(x^2 + 3xy + y - 1) = 2x + 3y$$

因此，$\partial f / \partial x$在$(4, -5)$处的值为$2 \times 4 + 3 \times (-5) = -7$。

接下来计算函数对y的偏导，将x看作常量：

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y}(x^2 + 3xy + y - 1) = 3x + 1$$

因此，$\partial f / \partial y$在$(4, -5)$处的值为$3 \times 4 + 1 = 13$。

多元复合函数求导

首先来考虑一元函数与多元函数复合的情况。若函数$u = \phi(x)$和函数$v = \psi(x)$都在点x可导，函数$z = f(u, v)$在对应点(u, v)具有连续偏导数，那么复合函数$z = f(\phi(x), \psi(x))$在点x可导，其导数为

$$\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} = \frac{\partial z}{\partial u}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + \frac{\partial z}{\partial v}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}$$

例如，令$z = f(u, v) = u^2 - v^2$，$u = \phi(x) = x^2 - 1$，$v = \psi(x) = 3x + 2$，则复合函数z对x的导数可计算为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}z}{\mathrm{d}x} &= \frac{\partial z}{\partial u}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x} + \frac{\partial z}{\partial v}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} \\ &= 2u \times 2x + (-2v) \times 3 \\ &= 4x^3 - 10x - 12\end{aligned}$$

多元复合函数的求导

然后考虑多元函数与多元函数复合的情况。如果函数$u=\phi(x,y)$与函数$v=\psi(x,y)$具有对x和y的偏导数，函数$z=f(u,v)$在对应点(u,v)具有连续偏导数，那么复合函数$z=f(\phi(x,y),\psi(x,y))$在点(x,y)的两个偏导数存在：

$$\frac{\partial z}{\partial x}=\frac{\partial z}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial z}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial x}$$

$$\frac{\partial z}{\partial y}=\frac{\partial z}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial y}+\frac{\partial z}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial y}$$

例如，令$z=f(u,v)=u+v$，$u=\phi(x,y)=xy$，$v=\psi(x,y)=x+y$，则复合函数z对x和y的偏导数分别是

$$\frac{\partial z}{\partial x}=y+1,\quad \frac{\partial z}{\partial y}=x+1$$

梯度

设二元函数$z=f(x,y)$在平面区域D上具有一阶连续偏导数，则对于每一个点(x,y)可以定义一个向量，称为函数$z=f(x,y)$在点(x,y)的梯度，记作

$$\nabla f(x,y)=\left(\frac{\partial f}{\partial x},\frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

例如，令$z=f(x,y)=x^2-y^3$，则x和y的偏导函数为

$$\frac{\partial f}{\partial x}=2x,\quad \frac{\partial f}{\partial y}=3y^2$$

因此，函数$f(x,y)$在点$(2,1)$处的梯度是一个二维向量$(4,3)$。多元函数的梯度可以类似地计算。梯队对于计算多元函数的极值而言非常重要，在深度学习的参数优化中被广泛使用。

多元函数极值

设函数$z=f(x,y)$在点(x_0,y_0)的某个邻域内有定义，对于该邻域内异于(x_0,y_0)的点，如果不等式

$$f(x,y)<f(x_0,y_0)$$

成立，则称函数$f(x,y)$在点(x_0,y_0)处有极大值。如果不等式

$$f(x,y)>f(x_0,y_0)$$

成立，则称函数$f(x,y)$在点(x_0,y_0)处有极小值。

例如，函数$z=3x^2+4y^2$在点(0,0)处有极小值，因为除了(0,0)以外所有的点的函数值均为正，只有在点(0,0)处的函数值为0。与之相反，函数$z=-\sqrt{x^2+y^2}$在点(0,0)处有极大值，因为除了(0,0)以外所有的点的函数值均为负，只有在点(0,0)处的函数值为0。

多元函数极值条件

定理1（必要条件）：设函数$z = f(x, y)$在点(x_0, y_0)处具有偏导数，且在点(x_0, y_0)处有极值，则函数在该点的偏导数必然为0：

$$f_x(x_0, y_0) = 0, \quad f_y(x_0, y_0) = 0$$

定理2（充分条件）：设函数$z = f(x, y)$在点(x_0, y_0)的某邻域内连续且有一阶及二阶连续偏导数，并且$f_x(x_0, y_0) = 0$，$f_y(x_0, y_0) = 0$，令

$$f_{xx}(x_0, y_0) = A, \quad f_{xy}(x_0, y_0) = B, \quad f_{yy}(x_0, y_0) = C$$

则$f(x, y)$在(x_0, y_0)处是否取得极值的条件如下：

① 当$AC - B^2 > 0$时有极值，当$A < 0$时有极大值，$A > 0$时有极大值。

② 当$AC - B^2 < 0$时没有极值。

③ 当$AC - B^2 = 0$时可能有极值，也可能没有极值。

求多元函数极值

求二元函数$f(x,y) = x^3 - y^3 + 3x^2 + 3y^2 - 9x$的极值。

首先求解一阶导数组成的方程组：

$$f_x(x,y) = 3x^2 + 6x - 9 = 0$$

$$f_y(x,y) = -3y^2 + 6y = 0$$

得到四组解：(1, 0)、(1, 2)、(−3, 0)和(−3, 2)。它们不一定都是极值点，需要进一步考察二阶导数：

$$f_{xx}(x,y) = 6x + 6$$

$$f_{xy}(x,y) = 0$$

$$f_{yy}(x,y) = -6y + 6$$

求多元函数极值

对四个解分别计算A、B和C，考察定理2的条件。

① $(1, 0)$：$AC - B^2 = 12 \times 6 > 0$且$A = 12 > 0$，因此$(1, 0)$是函数$f(x, y)$的一个极小值点，对应的极小值是$f(1,0) = -5$。

② $(1, 2)$：$AC - B^2 = 12 \times (-6) < 0$，因此$(1, 2)$不是函数$f(x, y)$的极值点。

③ $(-3, 0)$：$AC - B^2 = (-12) \times 6 < 0$，因此$(-3, 0)$不是函数$f(x, y)$的极值点。

④ $(-3, 2)$：$AC - B^2 = (-12) \times (-6) > 0$且$A = -12 > 0$，因此$(-3, 2)$是函数$f(x, y)$的一个极大值点，对应的极大值是$f(-3, 2) = -31$。

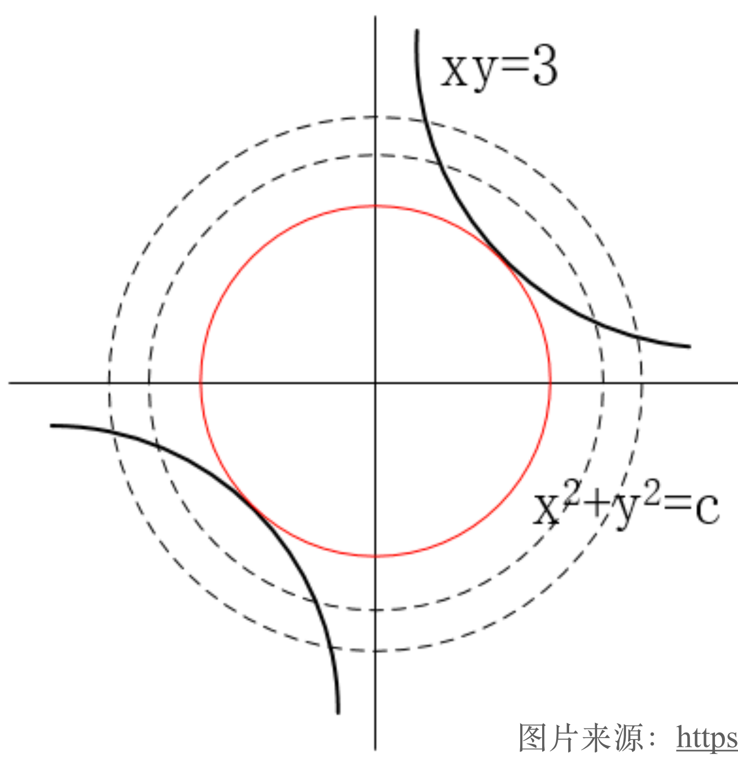
拉格朗日乘子法

求函数$z = f(x, y)$在满足$g(x, y) = 0$下的条件极值，可以转化为函数

$$F(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda g(x, y)$$

的无约束条件极值问题。

例如，给定双曲线$xy = 3$求该曲线上距离原点最近的点。这是一个典型的带约束的求极值问题。



图片来源：https://www.cnblogs.com/maybe2030/p/4946256.html

拉格朗日乘子法

原始问题可以转化为

$$F(x, y, \lambda) = x^2 + y^2 + \lambda(xy - 3)$$

计算函数$F(x, y, \lambda)$的一阶偏导，得到方程组：

$$F_x(x, y, \lambda) = 2x + \lambda y = 0$$

$$F_y(x, y, \lambda) = 2y + \lambda x = 0$$

$$F_\lambda(x, y, \lambda) = xy - 3 = 0$$

求解该方程组，可以得到$\lambda = 2$或$\lambda = -2$。当$\lambda = 2$时，无法求解x和y，因为势必有$-x^2 = 3$。当$\lambda = -2$时，有两组解：$(\sqrt{3}, \sqrt{3})$和$(-\sqrt{3}, -\sqrt{3})$。

拉格朗日乘子法在自然语言处理中具有非常广泛的应用，必须熟练掌握。

内容提要

微积分

概率论

线性代数

信息论

随机试验

具备以下三个特点的试验称为随机试验：

① 可以在相同的条件下重复地运行；

② 每次试验的可能结果可能不止一个，并且能事先明确试验的所有可能结果；

③ 进行一次试验之前不能确定哪一个结果会出现。

以下是一些随机试验的例子：

① 抛一枚硬币，观察正面H、反面T出现的情况。

② 抛一颗骰子，观察出现的点数。

③ 在一批灯泡里任意抽取一只，测试它的寿命。

样本空间

对于随机试验，尽管在每次试验之前不能预知试验的结果，但试验的所有可能结果组成的集合是已知的。我们将随机试验E的所有可能结果组成的集合称为E的样本空间，记为S。样本空间中的元素，称为样本点。

例如，给定以下随机试验

① E_1：抛一枚硬币，观察正面H、反面T出现的情况。

② E_2：抛一颗骰子，观察出现的点数。

③ E_3：在一批灯泡里任意抽取一只，测试它的寿命。

对应的样本空间是：

① $S_1 : \{H, T\}$

② $S_2 : \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$

③ $S_3 : \{t \mid t \geq 0\}$

随机事件

试验E的样本空间S的子集称为E的随机事件，简称为事件。

例如，令“将一枚硬币抛掷两次，观察正面H、反面T出现的情况”是一个随机试验E，则其样本空间总共包含四个元素：

$$S = \{HH, HT, TT, TH\}$$

我们可以定义一个事件“第一次出现的是H”，即

$$A_1 = \{HH, HT\}$$

还可以定义另一个事件“两次出现的是同一面”，即

$$A_2 = \{HH, TT\}$$

显然，A_1和A_2都是样本空间的子集。

概率

设E是随机试验，S是样本空间。对于E的每一个事件A赋予一个实数，记为$P(A)$，称为事件A的概率。概率必须满足以下条件：

① 非负性：对于每一个事件A，有$P(A) \geq 0$；

② 规范性：对于必然发生的事件S，有$P(S) = 1$；

③ 可列可加性：设A_1、A_2、…是两两互不相容的事件，即对于$A_i \cap A_j = \varnothing$（$i \neq j$），有$P(A_1 \cup A_2 \cup \ldots) = P(A_1) + P(A_2) + \ldots$。

令A和B为任意两个事件，AB表示两个事件同时发生，以下公式成立：

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(AB)$$

对于前面抛掷两次硬币的例子，如果A表示"第一次是H"，B表示"两次结果都一样"，那么AB表示"两次都是H"。

等可能概型

等可能概型是指符合以下两个条件的随机试验：

① 试验的样本空间只能包含有限个元素；

② 试验中每个基本事件（即每个结果）发生的可能性基本相同。

例如，一个口袋里装有6只球，其中有4只白球和2只红球。从袋中取球两次，每次随机地取一只，假设每只球都有相等概率被抽中。第一次取一球不放回袋中，第二次从剩余的球中再取一球。计算：（1）取到的两只球都是白球的概率，（2）取到的两只球至少有一只是白球的概率。

首先计算两只球都是白球的概率：$(4/6) \times (3/5) = 2/5$。然后，先计算两只球都是红球的概率：$(2/6) \times (1/5) = 1/15$，然后可以得到取到的两只球至少有一只是白球的概率：$1 - (1/15) = 14/15$。

条件概率

设A和B是两个事件，且$P(A) > 0$，称

$$P(B|A) = \frac{P(AB)}{P(A)}$$

为在事件A发生的条件下事件B发生的条件概率。

不难验证，条件概率符合概率定义中的三个条件：

① 非负性：对于每个事件B，有$P(B|A) \geq 0$；

② 规范性：对于必然事件S，有$P(S|A) = 1$；

③ 可列可加性：设B_1、B_2、…是两两不相容的事件，则有

$$P\left(\cup_{i=1}^{\infty} B_i | A \right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(B_i | A)$$

条件概率

例如，一个口袋里装有6只球，其中有4只白球和2只红球。从袋中取球两次，每次随机地取一只，假设每只球都有相等的概率被抽中。第一次取一球不放回袋中，第二次从剩余的球中再取一球。设事件A为“第一次取到白球”，事件B为“第二次取到白球”，计算条件概率$P(B|A)$。

首先计算$P(A)$。由于开始口袋中有6只球，其中有4只白球，因此第一次取到白球的概率$P(A) = 4/6$。然后计算$P(AB)$，即事件“两次都抽到白球”的概率：

$$P(AB) = \frac{4}{6} \times \frac{3}{5} = \frac{2}{5}$$

因此，条件概率计算如下：

$$P(B|A) = \frac{P(AB)}{P(A)} = \frac{2}{5} \times \frac{6}{4} = \frac{3}{5}$$

全概率公式

设S为试验E的样本空间，$B_1, B_2, \ldots, B_n$为事件E的一组事件，如果以下两个条件成立

① $B_i \cap B_j = \varnothing, i \neq j, i, j = 1, \ldots, n$,

② $B_i \cup B_2 \cup \ldots \cup B_n = S$,

则称$B_1, B_2, \ldots, B_n$为样本空间S的一个划分。

例如，试验E“掷一颗骰子观察其点数”样本空间为$S = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$，则$B_1 = \{1, 2, 3\}$，$B_2 = \{4, 5\}$和$B_3 = \{6\}$是S的一个划分。

设A是试验E的一个事件，$B_1, B_2, \ldots, B_n$是其样本空间的一个划分，则以下全概率公式成立：

$$P(A) = \sum_{i=1}^{n} P(A \mid B_i) P(B_i)$$

贝叶斯公式

设A和B是随机试验E的任意两个事件，以下贝叶斯公式成立：

$$P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A)}$$

可以进一步与全概率公式结合起来。令$B_1, B_2, \ldots, B_n$是S的一个划分，而且$P(B_i) > 0 \ (i = 1, 2, \ldots, n)$，则有

$$P(B_i|A) = \frac{P(A|B_i)P(B_i)}{\sum_{j=1}^{n} P(A|B_j)P(B_j)}$$

贝叶斯公式在人工智能中非常重要，产生了重要的贝叶斯学派。贝叶斯公式对于揭示信息认知加工过程与规律、实现有效的学习和判断决策都具有十分重要的理论意义和实践价值。

独立性

设A和B是两个随机事件，如果满足等式

$$P(AB) = P(A)P(B)$$

则称事件A和B相互独立。

两个事件相互独立的含义是其中一个事件已发生，不影响另一个事件发生的概率。在实际应用中，对于事件的独立性通常是根据事件的实际意义去判断。如果根据实际情况分析，两个事件之间没有关联或者关联很弱，那么就认为它们之间是相互独立的。例如，如果甲、乙两人同一天感冒，甲在中国，乙在美国，双方并未接触，则可以认为两个事件是独立的。如果甲、乙是住在同一个宿舍的舍友，那么就不能认为是相互独立的。

在实际应用中，为了简化概率模型，通常会做很多独立性假设。

随机变量

将一枚硬币抛掷两次，观察出现正面H和反面T的情况，样本空间是

$$S=\{HH,HT,TT,TH\}$$

以X表示两次投掷得到正面H的总数，则X的取值是一个随机变量：

① $X=0$：当投掷结果是$\{TT\}$时；

② $X=1$：当投掷结果是$\{HT\}$或$\{TH\}$时；

③ $X=2$：当投掷结果是$\{HH\}$时。

随机变量的取值随试验的结果而定，在试验之前不能预知取什么值，并且其取值有一定的的概率。随机变量的引入，使我们能够描述各种随机现象，并能利用数学方法对随机试验的结果进行深入分析。

离散型随机变量

取值是有限个或可列举无限个的随机变量称为离散型随机变量。例如，抛掷一枚硬币，只可能取正面和反面两个取值，因此是离散型随机变量。

设离散型随机变量X可能的取值为x_k（$k=1,2,\ldots$），X取各个可能值的概率，即事件$\{X=x_k\}$的概率，为

$$P(X=x_k)=p_k,\ k=1,2,\ldots$$

上式称为离散型随机变量X的分布律。

注意，根据概率的定义，p_k满足以下两个条件：

① $p_k \geq 0,\ k=1,2,\ldots;$

② $\sum_{k=1}^{\infty} p_k = 1$。

离散型随机变量分布

以下两种离散型随机变量经常被使用。

第一个是$(0-1)$分布。设随机变量X只能取0和1两个值，其分布律为

$$P(X=k)=p^k(1-p)^{1-k}$$

其中，k的取值是0或1，$0<p<1$。

第二个是二项分布。设n是一个正整数，k是一个不大于n的非负整数，即$0\leq k\leq n$，某个随机事件A发生的概率为p，则在n次试验中事件A发生k次的概率为

$$P(X=k)=\binom{n}{k}p^k(1-p)^{n-k}$$

显然，当$n=1$时，二项分布等价于$(0-1)$分布。

随机变量的分布函数

对于非离散型随机变量，其取值不能一一列举，因此需要采用新的形式对离散型和非离散型随机变量进行统一描述。

设X是一个随机变量，x是任意实数，函数

$$F(x) = P(X \leq x)$$

称为X的分布函数。

对于任意两个实数x_1和x_2且满足$x_1 < x_2$，均有

$$\begin{aligned} P(x_1 < X \leq x_2) &= P(X \leq x_2) - P(X \leq x_1) \\ &= F(x_2) - F(x_1) \end{aligned}$$

因此，如果已知X的分布函数，我们就知道X落在任意区间$(x_1, x_2]$的概率。从这个意义上说，分布函数完整地描述了随机变量的统计规律性。

分布律与分布函数

X	-1	2	3
p_k	0.25	0.50	0.25

给定上表所示的分布律，相应的分布函数定义如下：

$$F(x) = \begin{cases} 0.00 & x < -1 \\ 0.25 & -1 \le x < 2 \\ 0.75 & 2 \le x < 3 \\ 1.00 & x \ge 3 \end{cases}$$

由此可见，分布函数可以全面地描述离散型随机变量。

连续型随机变量

如果对于随机变量X的分布函数$F(x)$，存在非负函数$f(x)$，使对于任意实数x有

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(t)\mathrm{d}t$$

则称X为连续型随机变量。$f(x)$称为X的概率密度函数，具有以下性质：

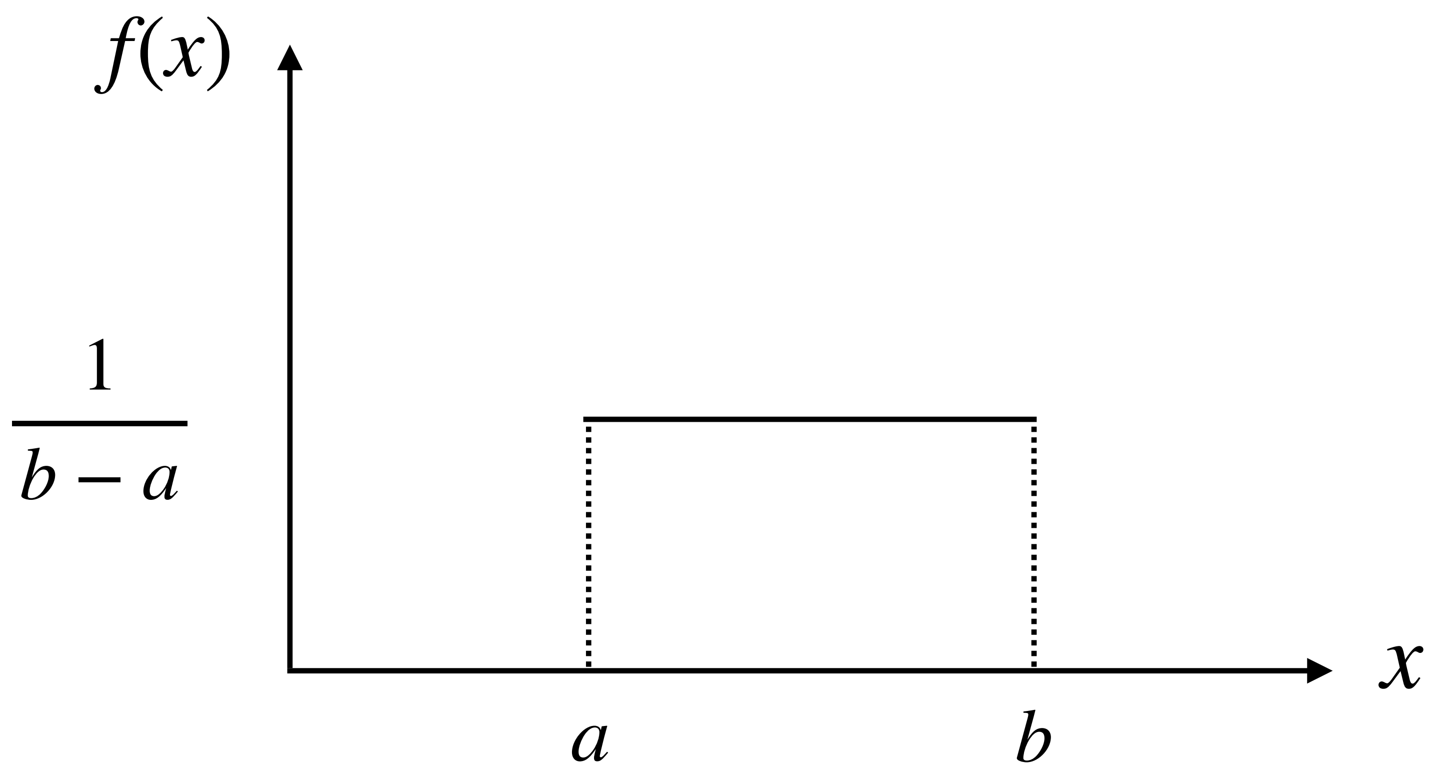
① $f(x) \geq 0$;

② $\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\mathrm{d}x = 1$;

③ 对于任意实数x_1和x_2（$x_1 \leq x_2$），$P(x_1 < X \leq x_2) = F(x_2) - F(x_1)$;

④ 若$f(x)$在点x处连续，则有$F'(x) = f(x)$。

均匀分布

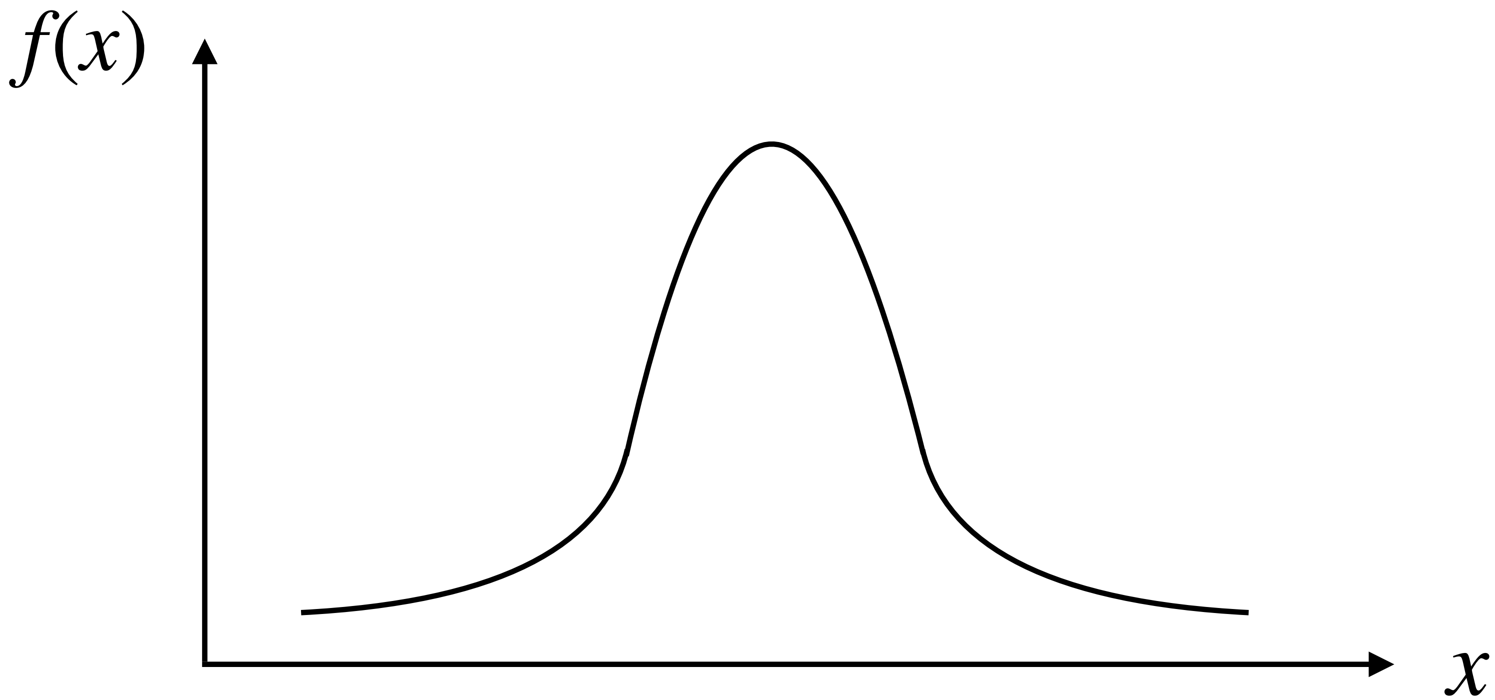


若连续型随机变量X具有概率密度

$$f(x) = \begin{cases} 1/(b-a) & \text{如果 } a < x < b \\ 0 & \text{否则} \end{cases}$$

则称X在区间(a, b)上服从均匀分布，记为$X \sim U(a, b)$。

正态分布



若连续型随机变量X具有概率密度

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

其中μ和σ实常数且$\sigma > 0$，则称X服从参数为μ和σ的正态分布或高斯分布，记作$X \sim N(\mu, \sigma^2)$。

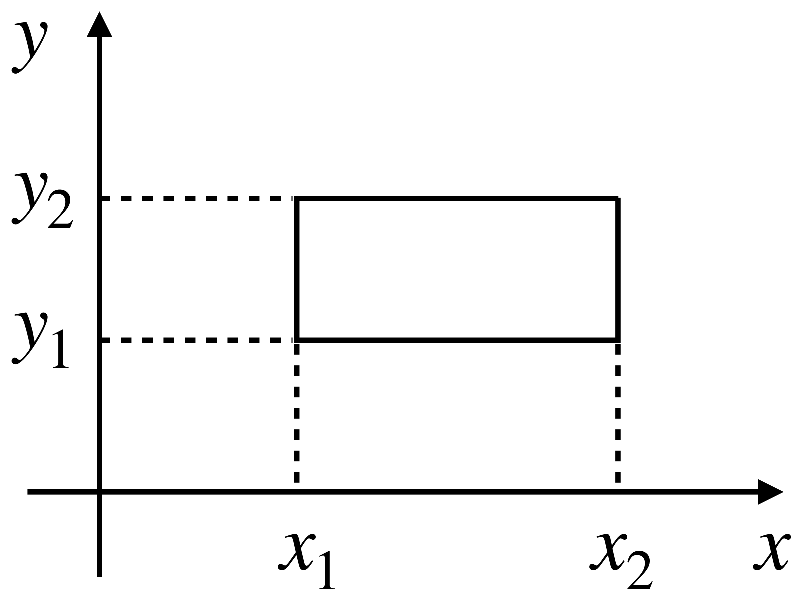
二维随机变量

之前只限于讨论单个随机变量的情况，实际问题中经常出现多个随机变量的情况。例如，为了研究某一地区某一年龄段儿童的发育情况，需要统计儿童的身高和体重。

设(X, Y)是二维随机变量，对于任意实数x和y，二元函数

$$F(x, y) = P(X \leq x, Y \leq y)$$

称为二维随机变量(X, Y)的分布函数，或随机变量X和Y的联合分布函数。



$$P(x_1 < X \leq x_2, y_1 < Y \leq y_2)$$

$$= F(x_2, y_2) - F(x_2, y_1) - F(x_1, y_2) + F(x_1, y_1)$$

二维离散型随机变量

如果二维随机变量(X,Y)全部可能的取值是有限对或可列无限多对，则称(X,Y)是离散型的随机变量。设(X,Y)所有的可能取值为(x_i,y_j)，$i,j=1,2,\ldots$，则X和Y的联合分布律定义为

$$P(X=x,Y=y)=p_{ij}$$

联合分布律通常使用表格的方式来表示：

$Y \backslash X$	x_1	x_2	$\cdots$	x_i	$\cdots$
y_1	p_{11}	p_{21}	$\cdots$	p_{i1}	$\cdots$
y_2	p_{12}	p_{22}	$\cdots$	p_{i2}	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	
y_j	p_{1j}	p_{2j}	$\cdots$	p_{ij}	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	

二维连续型随机变量

对于二维随机变量(X, Y)的分布函数$F(x, y)$，如果存在非负的函数$f(x, y)$使得对于任意x和y都有

$$F(x, y) = \int_{-\infty}^{y} \int_{-\infty}^{x} f(u, v) \mathrm{d}u \mathrm{d}v$$

则称(X, Y)是连续型的二维随机变量，函数$f(x, y)$称为二维随机变量(X, Y)的概率密度，或成为随机变量X和Y的联合概率密度。

例如，给定概率密度

$$f(x, y) = \begin{cases} 2e^{-(2x+y)} & \text{如果 } x > 0,\ y > 0 \\ 0 & \text{否则} \end{cases}$$

可计算分布函数为$F(x, y) = (1 - e^{-2x})(1 - e^{-y})$，当$x > 0$且$y > 0$时。

边缘分布律

二维随机变量(X, Y)作为一个整体，具有分布函数$F(x, y)$，而X和Y都是随机变量，各自也有分布函数，分别记为$F_X(x)$和$F_Y(y)$，分别称为二维随机变量(X, Y)关于X和关于Y的边缘分布函数，定义如下：

$$F_X(x) = P(X \le x, Y < \infty) = F(x, \infty)$$

$$F_Y(y) = P(X < \infty, Y \le y) = F(\infty, y)$$

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X = x_i) = \sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y = y_j) = \sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

上述式子也称为二维离散型随机变量(X, Y)关于X和Y的边缘分布律。

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y = y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	
$P(X = x_i)$					

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X = x_i) = \sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y = y_j) = \sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘分布律

Y \ X	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	
$P(X=x_i)$					

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X=x_i)=\sum_{j=1}^{\infty}p_{ij}$$

$$P(Y=y_j)=\sum_{i=1}^{\infty}p_{ij}$$

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	
$P(X=x_i)$					

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X=x_i)=\sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y=y_j)=\sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$					

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X=x_i)=\sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y=y_j)=\sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$	0.2				

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X=x_i)=\sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y=y_j)=\sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y = y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X = x_i)$	0.2	0.2			

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X = x_i) = \sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y = y_j) = \sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y = y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X = x_i)$	0.2	0.2	0.5		

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X = x_i) = \sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y = y_j) = \sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y = y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X = x_i)$	0.2	0.2	0.5	0.1	

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X = x_i) = \sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y = y_j) = \sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$	0.2	0.2	0.5	0.1	1.0

随机变量X和Y的分布律分别定义为

$$P(X=x_i)=\sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}$$

$$P(Y=y_j)=\sum_{i=1}^{\infty} p_{ij}$$

边缘概率密度

对于连续型随机变量(X, Y)，设其概率密度为$f(x, y)$，由于

$$F_X(x) = F(x, \infty) = \int_{-\infty}^{x} \left(\int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \mathrm{d}y \right) \mathrm{d}x$$

由此可知X是一个连续型随机变量，而且其概率密度函数为

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \mathrm{d}y$$

同样，Y也是一个连续型随机变量，其概率密度为

$$f_Y(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) \mathrm{d}x$$

$f_X(x)$和$f_Y(y)$分别是关于X和关于Y的边缘概率密度。

条件分布律

下面来考虑事件$\{Y=y_j\}$在已发生的条件下事件$\{X=x_i\}$发生的概率，也就是求事件$\{X=x_i|Y=y_j\}$的概率。

设(X,Y)是二维离散型随机变量，对于固定的j，若$P(Y=y_j)>0$，则称

$$P(X=x_i|Y=y_j)=\frac{P(X=x_i,Y=y_j)}{P(Y=y_j)}$$

为在$Y=y_j$条件下随机变量X的条件分布律。

类似地，对于固定的i，若$P(X=x_i)>0$，则称

$$P(Y=y_j|X=x_i)=\frac{P(X=x_i,Y=y_j)}{P(X=x_i)}$$

为在$X=x_i$条件下随机变量Y的条件分布律。

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	
$P(X=x_i)$					

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	
$P(X=x_i)$					

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	
$P(X=x_i)$					

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

Y \ X	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$					

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$	0.2				

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$	0.2	0.2			

$$P(Y=y_1 | X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 | X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 | X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$	0.2	0.2	0.5		

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$	0.2	0.2	0.5	0.1	

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件分布律

$Y \backslash X$	x_1	x_2	x_3	x_4	$P(Y=y_j)$
y_1	0.1	0.0	0.3	0.0	0.4
y_2	0.0	0.2	0.0	0.0	0.2
y_3	0.1	0.0	0.2	0.1	0.4
$P(X=x_i)$	0.2	0.2	0.5	0.1	1.0

$$P(Y=y_1 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_1)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

$$P(Y=y_2 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_2)}{P(X=x_1)} = \frac{0.0}{0.2} = 0.0$$

$$P(Y=y_3 \mid X=x_1) = \frac{P(X=x_1, Y=y_3)}{P(X=x_1)} = \frac{0.1}{0.2} = 0.5$$

条件概率密度

设二维随机变量(X, Y)的概率密度为$f(x, y)$，(X, Y)关于Y的边缘概率密度为$f_Y(y)$。若对于固定的y，$f_Y(y) > 0$，则在$Y = y$条件下X的条件概率密度定义为：

$$f_{X|Y}(x \mid y) = \frac{f(x, y)}{f_Y(y)}$$

与之对应地，在$Y = y$条件下X的条件分布函数定义为：

$$F_{X|Y}(x \mid y) = \int_{-\infty}^{x} \frac{f(x, y)}{f_Y(y)} \mathrm{d}x$$

类似地，我们也可以定义在$X = x$条件下Y的条件概率密度和条件分布函数。

相互独立的随机变量

设$F(x,y)$、$F_X(x)$和$F_Y(y)$分别是二维随机变量(X,Y)的分布函数及边缘概率分布，如果对于所有的x和y有

$$P(X \le x, Y \le y) = P(X \le x)P(Y \le y)$$

即

$$F(x,y) = F_X(x)F_Y(y)$$

则称随机变量X和Y相互独立。

当X和Y是离散型随机变量时，X和Y相互独立的条件是

$$P(X = x_i, Y = y_j) = P(X = x_i)P(Y = y_j)$$

当X和Y是连续型随机变量时，X和Y相互独立的条件是

$$f(x,y) = f_X(x)f_Y(y)$$

数学期望

设离散型随机变量X的分布律为$P(X=x_k)=p_k$（$k \geq 1$），其数学期望定义为：

$$\mathbb{E}(X)=\sum_{k=1}^{\infty} x_k p_k$$

类似地，设连续型变量X的概率密度为$f(x)$，其数学期望定义为：

$$\mathbb{E}(X)=\int_{-\infty}^{\infty} x f(x) \mathrm{d} x$$

例如，假定$P(X=0)=0.3$，$P(X=1)=0.5$，$P(X=2)=0.2$，则X的数学期望计算如下：

$$\mathbb{E}(X)=0 \times 0.3+1 \times 0.5+2 \times 0.2=0.9$$

随机变量函数的数学期望

设Y是随机变量X的连续函数，即$Y = g(X)$。如果X是离散型随机变量，其分布律为$P(X = x_k) = p_k$（$k \geq 1$），则Y的数学期望定义为:

$$\mathbb{E}(Y) = \mathbb{E}(g(X)) = \sum_{k=1}^{\infty} g(x_k)p_k$$

如果X是连续型随机变量，其概率密度为$f(x)$，则Y的数学期望定义为:

$$\mathbb{E}(Y) = \mathbb{E}(g(X)) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)f(x)\mathrm{d}x$$

随机变量函数的数学期望在深度学习中有着十分广泛的应用，尤其是在估计概率模型参数方面，是必须熟练掌握的重要概念。

数学期望的性质

数学期望有以下重要性质:

① 设C为实常数，则有$\mathbb{E}(C) = C$。

② 设X是一个随机变量，C是常数，则有$\mathbb{E}(CX) = C\mathbb{E}(X)$。

③ 设X和Y是两个随机变量，则有$\mathbb{E}(X + Y) = \mathbb{E}(X) + \mathbb{E}(Y)$。这一性质可以推广到任意有限个随机变量之和的情况。

④ 设X和Y是两个相互独立的随机变量，则有$\mathbb{E}(XY) = \mathbb{E}(X)\mathbb{E}(Y)$。这一性质可以推广到任意有限个相互独立的随机变量之积的情况。

方差

方差用于度量随机变量与其均值的偏离程度。设X是一个随机变量，X的方差定义为：

$$D(X) = \mathrm{Var}(X) = \mathbb{E}((X - \mathbb{E}(X))^2)$$

我们通常将$\sqrt{D(X)}$记为$\sigma(X)$，称为标准差或者均方差。

对于离散型随机变量，方差计算公式为

$$D(X) = \sum_{k=1}^{\infty} (x_k - \mathbb{E}(X))^2 p_k$$

对于连续型随机变量，方差计算公式为

$$D(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \mathbb{E}(X))^2 f(x) \mathrm{d}x$$

方差

X	-1	2	5
p_k	0.10	0.70	0.20

$$\mathbb{E}(X) = 0.1 \times (-1) + 0.7 \times 2 + 0.2 \times 5 = 2.3$$

$$D(X) = 0.1 \times (-1 - 2.3)^2 + 0.7 \times (2 - 2.3)^2 + 0.3 \times (5 - 2.3)^2 = 2.61$$

X	-1	2	5
p_k	0.30	0.40	0.30

$$\mathbb{E}(X) = 0.3 \times (-1) + 0.4 \times 2 + 0.3 \times 5 = 2.0$$

$$D(X) = 0.3 \times (-1 - 2.0)^2 + 0.4 \times (2 - 2.0)^2 + 0.3 \times (5 - 2.0)^2 = 5.40$$

内容提要

微积分

概率论

线性代数

信息论

向量

n个有次序的数$a_1, a_2, \ldots, a_n$所组成的数组称为n维向量。这n个数称为该向量的n个分量，第i个数a_i称为第i个分量。向量通常表示为

$$\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$$

向量的模也称为向量的大小，定义如下：

$$||\mathbf{a}|| = \sqrt{a_1^2 + \ldots + a_n^2}$$

给定两个n维向量$\mathbf{a} = (a_1, \ldots, a_n)$和$\mathbf{b} = (b_1, \ldots, b_n)$，主要运算公式如下：

① 加法：$\mathbf{a} + \mathbf{b} = (a_1 + b_1, \ldots, a_n + b_n)$。

② 与数的乘法：设λ是一个实数，则$\lambda\mathbf{a} = (\lambda a_1, \ldots, \lambda a_n)$。

③ 内积：$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = (a_1 b_1, \ldots, a_n b_n)$。

矩阵

由$m \times n$个数a_{ij}（$i = 1,\ldots,m; j = 1,\ldots,n$）排成的$m$行$n$列的数表称为$m \times n$**矩阵**，记作

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

这$m \times n$个数称为矩阵$\mathbf{A}$的**元素**。行数和列数都等于n的矩阵称为**n阶方阵**。只有一行的矩阵称为**行向量**：

$$\mathbf{A} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$$

只有一列的矩阵称为**列向量**：

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}$$

矩阵的加法

设有两个$m \times n$矩阵$\mathbf{A} = (a_{ij})$和$\mathbf{B} = (b_{ij})$，那么矩阵$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$的和记为

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & \dots & a_{1n} + b_{1n} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & \dots & a_{2n} + b_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} + b_{m1} & a_{m2} + b_{m2} & \dots & a_{mn} + b_{mn} \end{pmatrix}$$

需要注意，只有两个矩阵的行数和列数相同时，才可以进行加法运算。设$\mathbf{A}$、$\mathbf{B}$和$\mathbf{C}$都是$m \times n$矩阵，则矩阵加法满足以下运算律:

① 交换律：$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{B} + \mathbf{A}$。

② 结合律：$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} = \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C})$

数与矩阵的乘法

实数λ与矩阵$\mathbf{A}$的乘积记作$\lambda\mathbf{A}$或$\mathbf{A}\lambda$，计算如下

$$\lambda\mathbf{A} = \mathbf{A}\lambda = \begin{pmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \ldots & \lambda a_{1n} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \ldots & \lambda a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \lambda a_{m1} & \lambda a_{m2} & \ldots & \lambda a_{mn} \end{pmatrix}$$

设$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$为$m \times n$矩阵，λ和μ为实数，则数与矩阵的乘法满足以下规律：

① $(\lambda\mu)\mathbf{A} = \lambda(\mu\mathbf{A})$

② $(\lambda + \mu)\mathbf{A} = \lambda\mathbf{A} + \mu\mathbf{A}$

③ $\lambda(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \lambda\mathbf{A} + \lambda\mathbf{B}$

矩阵与矩阵相乘

设$\mathbf{A}$是一个$m \times s$矩阵，$\mathbf{B}$是一个$s \times n$矩阵，那么矩阵$\mathbf{A}$与矩阵$\mathbf{B}$的乘积是一个$m \times n$矩阵$\mathbf{C} = \mathbf{AB}$，其中

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{s} a_{ik} b_{kj}$$

其中，a_{ik}是矩阵$\mathbf{A}$的元素，b_{kj}是矩阵$\mathbf{B}$的元素，c_{ij}是矩阵$\mathbf{C}$的元素。注意，当且仅当左矩阵的列数等于右矩阵的行数时，两个矩阵才能相乘。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & -1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 3 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & -2 & -1 \\ 9 & 9 & 11 \end{pmatrix}$$

矩阵的转置

把矩阵$\mathbf{A}$的行换成同序数的列得到一个新矩阵，称为$\mathbf{A}$的转置矩阵，记作$\mathbf{A}^\top$。例如：

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 9 & -2 & -1 \\ 9 & 9 & 11 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{A}^\top = \begin{pmatrix} 9 & 9 \\ -2 & 9 \\ -1 & 11 \end{pmatrix}$$

矩阵的转置满足下述运算规律：

① $(\mathbf{A}^\top)^\top = \mathbf{A}$

② $(\mathbf{A}+\mathbf{B})^\top = \mathbf{A}^\top + \mathbf{B}^\top$

③ $(\lambda\mathbf{A})^\top = \lambda\mathbf{A}^\top$

④ $(\mathbf{AB})^\top = \mathbf{B}^\top\mathbf{A}^\top$

方阵的行列式

由n阶方阵$\mathbf{A}$的元素所构成的行列式，称为方阵$\mathbf{A}$的行列式，记作$|\mathbf{A}|$或$\det\mathbf{A}$。给定一个两行两列的方阵，其行列式计算公式为

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \qquad \det\mathbf{A} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

例如，给定一个方阵

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

其行列式计算如下

$$\det\mathbf{A} = \begin{vmatrix} 3 & -2 \\ 2 & 1 \end{vmatrix} = 3 \times 1 - 2 \times (-2) = 7$$

三阶行列式

三行三列的方阵的行列式的计算更复杂一些，基本规律是先按照正向（即从上方往右下方）对角线求和，再按照反向（即从上方往左下方）对角线求和，最后计算两者之差。

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

$$= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} -$$
$$a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

对角矩阵

不在对角线上的元素都是0的矩阵称为对角矩阵：

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

该对角矩阵通常也记作：$\mathbf{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$

一个特殊的对角阵是单元阵，所有的对角线元素都为1：

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

逆矩阵

对于n阶矩阵$\mathbf{A}$，如果有一个n阶矩阵$\mathbf{B}$

$$\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{E}$$

则说矩阵$\mathbf{A}$是可逆的，并把矩阵$\mathbf{B}$称为$\mathbf{A}$的逆矩阵。$\mathbf{A}$的逆矩阵通常记为$\mathbf{A}^{-1}$。对于可逆矩阵，有以下性质：

① 如果矩阵$\mathbf{A}$是可逆的，那么$\mathbf{A}$的逆矩阵是唯一的。

② 如果矩阵 $\mathbf{A}$可逆，则$|\mathbf{A}| \neq 0$。

③ 如果$\mathbf{AB} = \mathbf{E}$或$\mathbf{BA} = \mathbf{E}$，则$\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$。

④ 如果$\mathbf{A}$可逆，则$\mathbf{A}^{-1}$亦可逆，且$(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}$。

⑤ 如果$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$为同阶矩阵且均可逆，则$\mathbf{AB}$亦可逆，且$(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$。

矩阵的初等变换

给定一个矩阵，以下三种变换称为初等行变换：

① 对调第i行和第j行，记作$r_i \leftrightarrow r_j$。

② 第i行的所有元素乘以实数k，记作kr_i。

③ 把第j行所有元素的k倍加到第i行对应的元素上，记作$r_i + kr_j$。

同理，可以定义矩阵的初等列变换：

① 对调第i列和第j列，记作$c_i \leftrightarrow c_j$。

② 第i列的所有元素乘以实数k，记作kc_i。

③ 把第j列所有元素的k倍加到第i列对应的元素上，记作$r_i + kc_j$。

矩阵的初等变换

执行多步初等变换操作将矩阵**A**转换为矩阵**F**。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -2 & 1 & 4 \\ 4 & -6 & 2 & -2 & 4 \\ 3 & 6 & -9 & 7 & 9 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

标准形与矩阵的秩

对于$m \times n$矩阵$\mathbf{A}$，总可以经过初等行变换和列变换将其化简为以下形式

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_r & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{O} \end{pmatrix}_{m \times n}$$

其中，$\mathbf{E}_r$表示维度为r的单元方阵，$\mathbf{O}$表示元素全为0的矩阵。$\mathbf{F}$称为标准形，r称为矩阵的秩。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -2 & 1 & 4 \\ 4 & -6 & 2 & -2 & 4 \\ 3 & 6 & -9 & 7 & 9 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

方阵的特征值和特征向量

设**A**是n阶矩阵，如果存在实数λ和n维非零列向量**x**使得以下等式成立：

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

则称λ是矩阵**A**的特征值，非零向量**x**为**A**的对应于特征λ的特征向量。

例如，以下等式成立

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -4 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

矩阵的特征值和特征向量并不唯一。

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ -4 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \times \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

内容提要

微积分

概率论

线性代数

信息论

信息量

什么是信息量？假设我们听到了两件事，分别如下：

- 事件A：巴西队获得了2022年FIFA世界杯冠军。
- 事件B：中国队获得了2022年FIFA世界杯冠军。

仅凭直觉来说，显而易见事件B的信息量比事件A的信息量要大（也就是“大新闻”）。究其原因，是因为事件A发生的概率很大，事件B发生的概率很小。所以当越不可能的事件发生了，我们获得的信息量就越大，而越可能发生的事件发生了，我们获得的信息量就越小。

因此，信息量应该和事件发生的概率有关。

熵

如果X是一个离散型随机变量，其概率分布为$P(X=x)=p(x)$，$x \in \mathcal{X}$。其中，$\mathcal{X}$表示随机变量所有取值的集合，则该随机变量的熵为：

$$H(X) = -\sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log_2 p(x)$$

我们约定$0 \log_2 0 = 0$。

熵表示信源每发出一个符号所提供的平均信息量。一个随机变量的熵越大，其不确定性越大，相应地正确估计其值的可能性就越小。越不确定的随机变量需要越大的信息量来确定其值。

熵是一个非常重要的概念，在计算机科学中的很多领域都有着重要的应用，必须数量掌握。

熵的计算

x	-1	2	3
$p(x)$	0.25	0.50	0.25

$$H(X) = -0.25 \times \log_2 0.25 - 0.5 \times \log_2 0.5 - 0.25 \times \log_2 0.25$$
$$= 1.50$$

x	-1	2	3
$p(x)$	0.33	0.34	0.33

$$H(X) = -0.33 \times \log_2 0.33 - 0.34 \times \log_2 0.34 - 0.33 \times \log_2 0.33$$
$$= 1.58$$

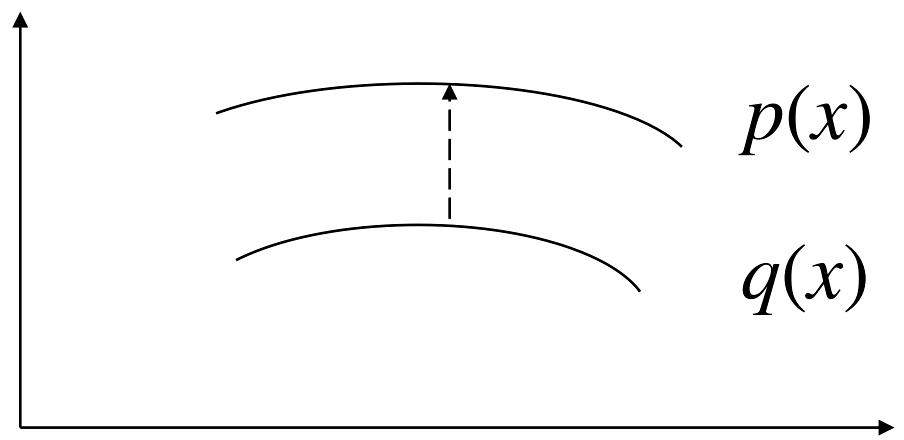
相对熵

两个概率分布$p(x)$和$q(x)$的相对熵也称为KL散度（英文全称：Kullback-Leibler divergence），定义如下：

$$\mathrm{KL}(p\,||\,q) = \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)}$$

约定$0 \log(0/q) = 0$，$p \log(p/0) = \infty$。

相对熵通常用于衡量两个概率分布的差距。当两个随机分布相同时，其相对熵为0。当两个随机分布的差别增加时，其相对熵也增加。



相对熵的计算

X	0	1
$p(X)$	1/2	1/2
$q_1(X)$	1/4	3/4
$q_2(X)$	1/8	7/8

给定上述概率分布，分别计算两个交叉熵

$$\mathrm{KL}(p||q_1) = \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\times\frac{4}{1}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\times\frac{4}{3}\right) = 0.21$$

$$\mathrm{KL}(p||q_2) = \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\times\frac{8}{1}\right) + \frac{1}{2}\log_2\left(\frac{1}{2}\times\frac{8}{7}\right) = 0.60$$

由于$q_1(X)$相对于$q_2(X)$更接近于$p(X)$，相对熵的值也更小。

交叉熵

相对熵的公式可以表述为

$$\mathrm{KL}(p\,||\,q) = \sum_x p(x)\log p(x) - \sum_x p(x)\log q(x)$$

$$= -H(p(x)) - \sum_x p(x)\log q(x)$$

等式的前一部分是p的熵，而后一部分则是交叉熵：

$$H(p,q) = \sum_x p(x)\log q(x)$$

在人工智能中，往往需要评估模型分布和真实分布之间的差距，使用KL散度非常合适。但由于KL散度的前一部分跟真实分布相关，在优化过程中不变化，因此一般使用交叉熵作为损失函数并评估模型。

总结

- 数学是人工智能的基石，必须牢固掌握必备的数学基础知识，才能理解后续核心模型和算法。
- 主要知识点如下：
  - 微积分：多元函数偏导和极值的计算
  - 概率论：多维随机变量、数学期望
  - 线性代数：向量与矩阵的运算
  - 信息论：熵、相对熵、交叉熵

谢谢