12

Conditional Gaussian Distributions

条件高斯分布

假设随机变量服从高斯分布,讨论条件期望、条件方差



生命就像一个永恒的春天,穿着崭新而绚丽的衣服站在我面前。

Life stands before me like an eternal spring with new and brilliant clothes.

—— 卡尔·弗里德里希·高斯 (Carl Friedrich Gauss) | 德国数学家、物理学家、天文学家 | 1777 ~ 1855



- matplotlib.pyplot.contour() 绘制等高线图
- ◀ matplotlib.pyplot.contour3D() 绘制三维等高线图
- ◀ matplotlib.pyplot.contourf() 绘制填充等高线图
- ◀ matplotlib.pyplot.fill_between() 区域填充颜色
- ◀ matplotlib.pyplot.plot_wireframe() 绘制线框图
- ✓ scipy.stats.norm() 一元正态分布对象



12.1 联合概率和条件概率关系

本章是本书第 8 章的延续。本书第 8 章专门介绍了离散、连续随机变量的条件**期望** (conditional expectation)、条件**方差** (conditional variance)。本章将这些数学工具用在高斯分布上。

本节首先回顾条件概率 (conditional probability)。

条件概率

本章第3章介绍过,条件概率是指某事件在另外一个事件已经发生条件下的概率。

以图 1 为例, X 和 Y 为连续随机变量, (X, Y) 服从二元高斯分布。(X, Y) 的联合概率密度函数 PDF $f_{X,Y}(x,y)$ 为图 1 所示曲面。

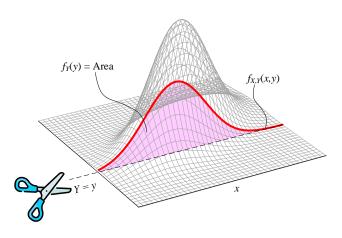
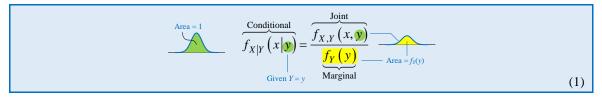


图 1. 高斯二元分布 PDF 曲面沿着 Y = y 切一刀

给定 Y = y 条件下,相当于在图 1 上沿着 Y = y 切一刀,得到的红色曲线便是 $f_{X,Y}(x,y)$ 。

几何视角来看,给定 Y = y 的条件下 $(f_Y(y) > 0)$,利用贝叶斯定理,X 的条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 相当于对 $f_{X,Y}(x,y)$ 曲线用边缘 PDF $f_Y(y)$ 归一化:



注意,此时 $f_{Y}(y)$ 代表一个具体的值,但是这个值仍然是概率密度,而不是概率。

分解来看,Y = y 时,联合 PDF $f_{X,Y}(x,y)$ 这条曲线和横轴围成的面积为边缘 PDF $f_{Y}(y)$,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

$$\underbrace{f_{Y}(y)}_{\text{Marginal}} = \int_{x} \underbrace{f_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} dx$$
Given $Y = y$

Area = $f_{Y}(y)$

$$x$$

$$Given $Y = y$
(2)$$

归一化后的 $f_{X|Y}(x|y)$ 曲线和横轴围成的面积为 1, 即:

Area = 1
$$x = \int_{X} \int_{X/Y} (x | y) dx = 1$$
Given $Y = y$ (3)

沿着这个思路,让我们观察一组当Y取不同值时,高斯二元分布联合概率和条件概率的关系。

Y取特定值

如图 2 所示,当 y=-2 时,在联合 PDF 曲面在 y=-2 处切一刀,得到 $f_{X,Y}(x,y=-2)$ 对应图 2 中红色曲线。

 $f_{X,Y}(x, y = -2)$ 和横轴围成的面积便是边缘 PDF $f_Y(y = -2)$, 经过计算得知面积约为 0.05,即 $f_Y(y = -2) = 0.05$ 。再次强调,0.05 不是概率值,虽然它的大小某种程度上也代表"可能性"。

在给定 y = -2 条件下,条件 PDF $f_{X|Y}(x|y=-2)$ 可以通过下式计算得到:

$$f_{X|Y}(x|y=-2) = \frac{f_{X,Y}(x,y=-2)}{f_Y(y=-2)}$$
(4)

图 2 同时比较联合 PDF $f_{X,Y}(x, y = -2)$ 、边缘 PDF $f_{X}(x)$ 、条件 PDF $f_{X|Y}(x|y = -2)$ 三条曲线之间的关系。

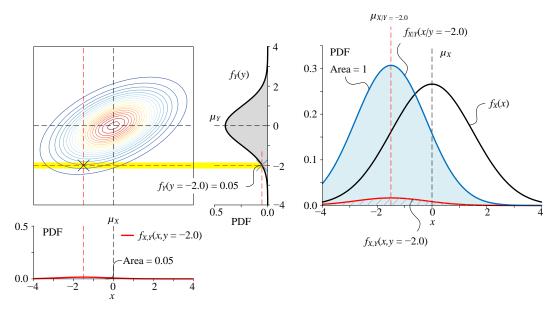


图 2. y= -2 时, 联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

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

从图像上可以清楚看到,条件 PDF $f_{X|Y}(x|y=-2)$ 相当于联合 PDF $f_{X,Y}(x,y=-2)$ 在高度上放大约 20 倍 (= 1/0.05)。

值得反复强调的是,联合 PDF $f_{X,Y}(x, y = -2)$ 曲线和横轴围成的面积约为 0.05,然而条件 PDF $f_{X|Y}(x|y = -2)$ 曲线和横轴围成的面积为 1。

Y取不同值

图 2 到图 6 五幅图分别展示当 y 取值分别为-2、-1、0、1、2 时,联合 PDF 和条件 PDF 关系。

有几点值得注意。五幅图像上概率曲线形状都是类似高斯一元分布曲线。

Y = y 直线和联合 PDF 等高线某一个椭圆椭圆相切,而当 y 变化时,切点似乎沿着直线运动。

切点的横轴取值对应条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 曲线的对称轴,而这个对称轴又是条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 曲线的**期望**。这个**期望**值就是本书第 8 章介绍的条件**期望** (conditional expectation) E(X|Y=y)。

图 2 到图 6 五幅图条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 对应的蓝色曲线,似乎在形状上没有任何变化,仅仅是对称轴发生移动。这一点说明,y 取值变化时,条件 PDF 曲线对应分布的**方差**似乎没有变化;这个**方差**就是本书第 8 章介绍的条件**方差** (conditional variance) var(X|Y=y)。

这一节先给大家一个直观印象,本章之后将会利用高斯二元分布对条件概率、条件**期望**、条件**方差**等概念进行定量研究。

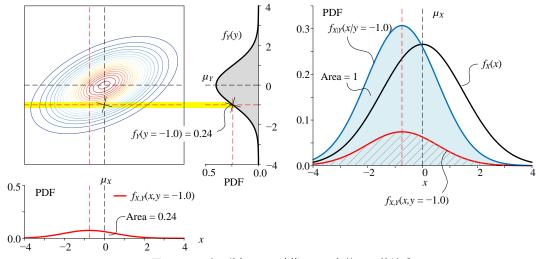


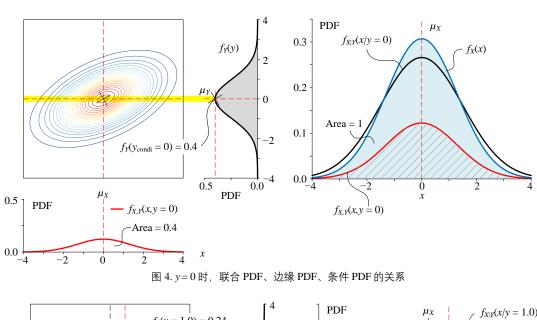
图 3. y= -1 时, 联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

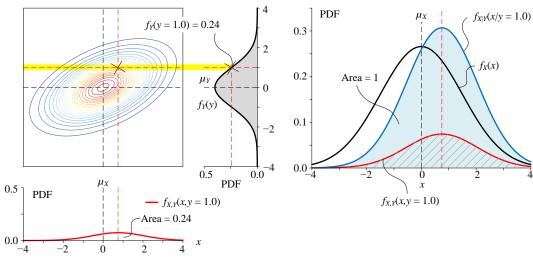
本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。

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





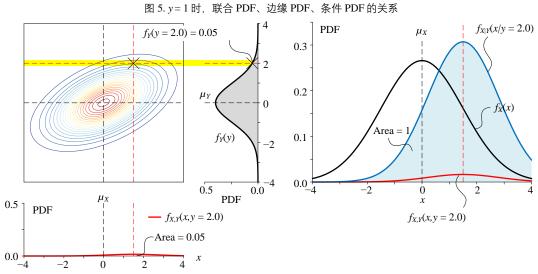


图 6. y=2 时, 联合 PDF、边缘 PDF、条件 PDF 的关系

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



Bk5_Ch12_01.py 绘制图 2~图 6。

12.2 给定 X 条件下,Y 的条件概率:以二元高斯为例

如果 (X, Y) 服从二元高斯分布,联合 PDF $f_{X,Y}(x,y)$ 解析式如下:

$$f_{X,Y}(x,y) = \frac{1}{2\pi\sigma_X\sigma_Y\sqrt{1-\rho_{X,Y}^2}} \times \exp\left(\frac{-1}{2} \frac{1}{\left(1-\rho_{X,Y}^2\right)} \left(\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)^2 - 2\rho_{X,Y}\left(\frac{x-\mu_X}{\sigma_X}\right)\left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right) + \left(\frac{y-\mu_Y}{\sigma_Y}\right)^2\right)\right)$$
(5)

利用条件 PDF、联合 PDF、边缘 PDF 三者关系,我们可以求得在给定 X = x 条件下,条件 PDF $f_{YX}(y|x)$ 解析式为:

$$f_{Y|X}(y|x) = \frac{1}{\sigma_{Y}\sqrt{1 - \rho_{X,Y}^{2}}\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y - \left(\mu_{Y} + \rho_{X,Y}\frac{\sigma_{Y}}{\sigma_{X}}(x - \mu_{X})\right)}{\sigma_{Y}\sqrt{1 - \rho_{X,Y}^{2}}}\right)^{2}\right]$$
(6)

图 7 所示为 $f_{Y|X}(y|x)$ 曲面网格线。 $f_{Y|X}(y|x)$ 这个曲线的期望和方差对应条件期望 E(Y|X=x) 和条件方差 var(Y|X=x)。

可以发现当 X = x 取一定值时,(6) 解析式对应高斯正态分布,这印证了本书第 10 章的猜测。将 $f_{YX}(y|x)$ 曲面不同位置曲线投影在 y_Z 平面得到图 8,容易发现这些曲线的形状完全相同 (也就是条件<mark>标准差</mark>不变),但是曲线的中心位置变化 (也就是条件<mark>期望</mark>值变化)。

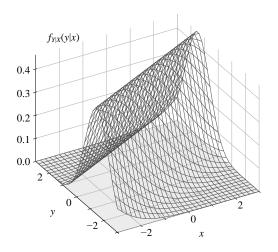


图 7. f_{YX}(y|x) 曲面网格线

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

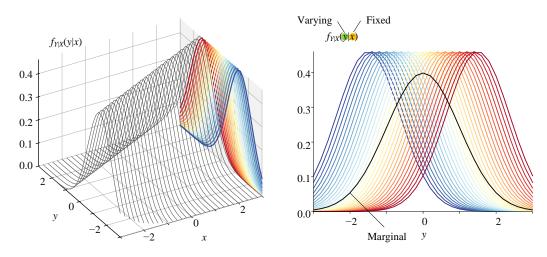


图 8. fyx(y|x) 曲面在 yz 平面上投影

条件期望 E(Y|X=x)

如果 (X, Y) 满足二元高斯分布,给定 X = x 条件下,Y 的条件 PDF $f_{Y|X}(y|x)$ 如图 9 所示。图 10 所示为 $f_{Y|X}(y|x)$ 平面等高线。条件期望 E(Y|X = x) 解析式为:

$$E(Y|X=x) = \mu_Y + \rho_{X,Y} \frac{\sigma_Y}{\sigma_X} (x - \mu_X)$$
 (7)

如图 10 所示,E(Y|X=x) 随着 X=x 取值线性变化;也就是说,E(Y|X=x) 和 x 的关系是一条直线。这条直线的一般式可以写成:

$$y = \mu_Y + \rho_{X,Y} \frac{\sigma_Y}{\sigma_X} (x - \mu_X)$$
 (8)

可以发现它的斜率为 $\rho_{X,Y}\sigma_{Y}/\sigma_{X}$,且通过点 (μ_{X},μ_{Y}) 。眼尖的读者一眼就会发现,这条曲线是 x 自变量、y 为因变量的 OLS 线性回归曲线解析式。本章最后一节将深入探讨这一话题,此外本书第 24 章也会展开讲解线性回归。

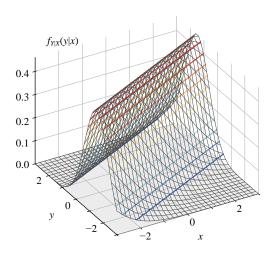


图 9. f_{YX}(y|x) 曲面等高线

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

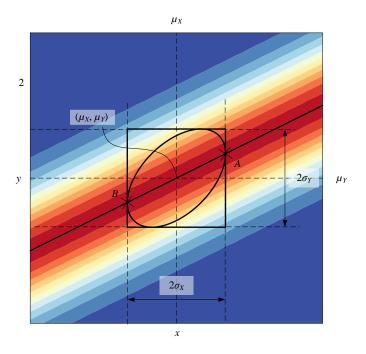


图 10. f_{YX}(y|x) 平面等高线

条件方差 var(Y|X=x)

给定 X = x 条件下,Y 的条件<mark>方差</mark> var(Y|X = x) 解析式为:

$$\operatorname{var}(Y|X=x) = (1 - \rho_{X,Y}^2)\sigma_Y^2 \tag{9}$$

给定 X = x 条件下,Y 的条件标准差 $\sigma_{Y|X=x}$ 解析式为定值:

$$\sigma_{Y|X=x} = \sqrt{1 - \rho_{X,Y}^2} \cdot \sigma_Y \tag{10}$$

这解释了为什么图 10 中的等高线为平行线。

图 11 所示为 $\sigma_{Y|X=x}$ 的几何含义。请大家格外注意图中的平行四边形,我们将在本书第 15 章还会看到这个平行四边形。

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

本书配套徽课视频均发布在 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

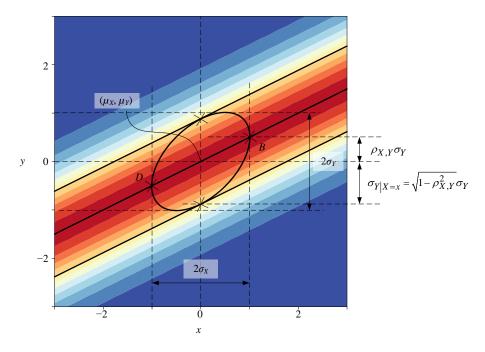


图 11. 条件标准差 σ_γχ 的几何含义



Bk5_Ch12_02.py 绘制图 7~图 10。

以鸢尾花为例: 条件期望 $E(X_2 | X_1 = x_1)$ 、条件方差 $var(X_2 | X_1 = x_1)$

以鸢尾花花萼长度 (X_1) 、花萼宽度 (X_2) 数据为例,假设 (X_1, X_2) 服从二元高斯分布。条件 PDF $f_{X_2|X_1}(x_2|x_1)$ 三维等高线和平面等高线如图 12 所示。

在给定 $X_1 = x_1$ 条件下, X_2 的条件期望 $E(X_2 | X_1 = x_1)$ 解析式为:

$$E(X_2 | X_1 = x_1) = \mu_2 + \rho_{1,2} \frac{\sigma_2}{\sigma_1} (x_1 - \mu_1)$$

$$= 3.057 - 0.117 \times \frac{0.434}{0.825} (x_1 - 5.843)$$

$$= -0.615x_1 + 3.417$$
(11)

条件**方差** $var(X_2|X_1=x_1)$ 为:

$$var(X_2 | X_1 = x_1) = (1 - \rho_{1,2}^2) \sigma_2^2 \approx 0.186$$
 (12)

条件**标准差** $\sigma_{X_2|X_1=x_1}$ 为:

$$\sigma_{X_2|X_1=x_1} = \sqrt{1 - \rho_{1,2}^2} \sigma_2 = 0.431 \tag{13}$$

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

如图 12 所示,不管 x_1 怎么变,这个条件**标准差** $\sigma_{X_2|X_1=x_1}$ 为定值。请大家对比第 8 章的类似图片。

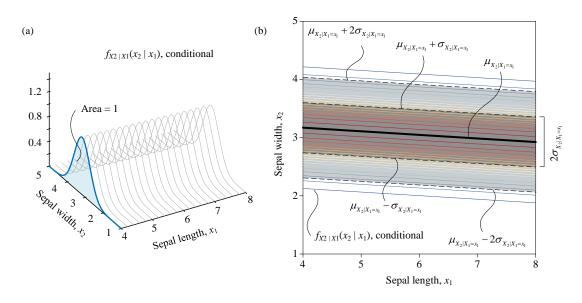


图 12. 条件 PDF $f_{X2|X1}(x_2|x_1)$ 三维等高线和平面等高线,不考虑分类

以鸢尾花为例,考虑标签

换个条件来看,如图 13 所示,给定鸢尾花分类条件,假设花萼长度服从高斯分布。请大家自行计算给定鸢尾花分类为条件,花萼长度的条件期望 $E(X_1 | Y = C_k)$ 、条件<mark>方差</mark> $var(X_1 | Y = C_k)$ 。

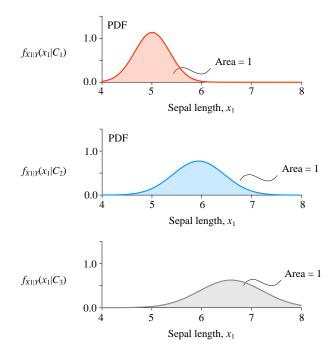


图 13. 给定鸢尾花标签 Y,花萼长度的条件**期望** $E(X_1 \mid Y = C_k)$ 、条件**方差** $var(X_1 \mid Y = C_k)$,离散随机变量

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

12.3 给定 Y条件下,X的条件概率:以二元高斯为例

如果 (X, Y) 服从二元高斯分布,给定 Y = y 条件下,X 的条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 解析式为:

$$f_{X|Y}(x|y) = \frac{1}{\sigma_X \sqrt{1 - \rho_{X,Y}^2} \sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x - \left(\mu_X + \rho_{X,Y} \frac{\sigma_X}{\sigma_Y} (y - \mu_Y)\right)}{\sigma_X \sqrt{1 - \rho_{X,Y}^2}}\right)^2\right)$$
(14)

图 14 所示为 $f_{X|Y}(x|y)$ 网格线。给定 Y=y 的条件下,条件 PDF $f_{X|Y}(x|y)$ 投影到 xz 平面上得到图 15。

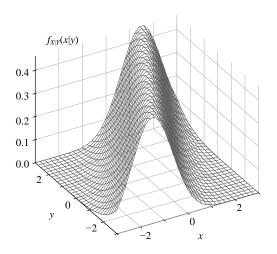


图 14. f_{X|Y}(x|y) 曲面网格线

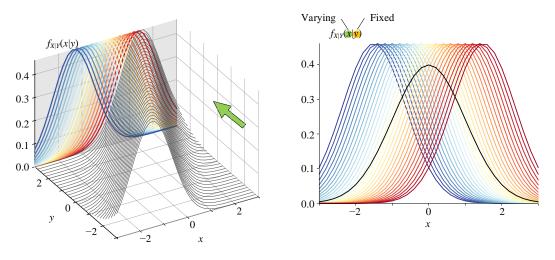


图 15. fx|x(x|y) 曲面在 xz 平面上投影

条件期望 E(X|Y=y)

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 16 所示为 $f_{X|Y}(x|y)$ 的平面等高线。图中的等高线都平行于给定 Y = y 条件下,X 的条件<mark>期望</mark> E(X|Y = y),具体解析式为:

$$E(X|Y=y) = \mu_X + \rho_{X,Y} \frac{\sigma_X}{\sigma_Y} (y - \mu_Y)$$
(15)

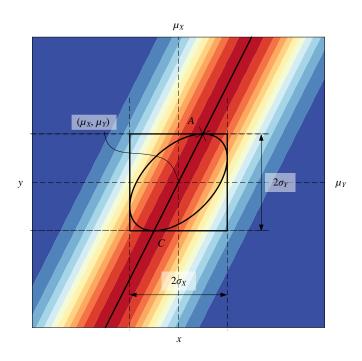


图 16. f_{X|Y}(x|y) 平面等高线

条件方差 var(X|Y=y)

给定 Y = y 条件下,Y 的条件**方差** var(X|Y = y) 解析式为:

$$\operatorname{var}(X|Y=y) = (1 - \rho_{X,Y}^2)\sigma_X^2 \tag{16}$$

给定 Y = y 条件下,Y的条件<mark>标准差</mark> $\sigma_{X|Y=y}$ 解析式也是定值:

$$\operatorname{std}(X|Y=y) = \sqrt{(1-\rho_{X,Y}^2)} \cdot \sigma_X \tag{17}$$

图 17 所示为条件标准差 $\sigma_{X|Y}$ 的几何含义。

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

本书配套徽课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

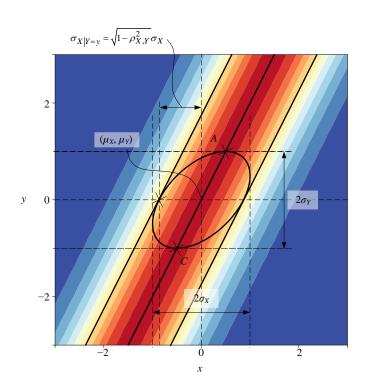


图 17. 条件标准差 $\sigma_{X|Y}$ 的几何含义

以鸢尾花为例: 条件期望 $E(X_1 | X_2 = x_2)$ 、条件方差 $var(X_1 | X_2 = x_2)$

以鸢尾花花萼长度 (X_1) 、花萼宽度 (X_2) 数据为例,假设 (X_1, X_2) 服从二元高斯分布。给定 $X_2 =$ x_2 条件下, X_1 的条件期望 $E(X_1 | X_2 = x_2)$ 解析式为:

$$E(X_1|X_2 = x_2) = \mu_1 + \rho_{1,2} \frac{\sigma_1}{\sigma_2} (x_2 - \mu_2)$$

$$= 5.843 - 0.117 \times \frac{0.825}{0.434} (x_2 - 3.057)$$

$$= -0.222x_2 + 6.523$$
(18)

条件**方差** $var(X_1|X_2=x_2)$ 解析式为:

$$\operatorname{var}\left(X_{1} \middle| X_{2} = x_{2}\right) = \left(1 - \rho_{1,2}^{2}\right) \sigma_{1}^{2} \approx 0.671 \tag{19}$$

条件标准差 $\sigma_{X_1|X_2=x_2}$ 解析式为定值:

$$\sigma_{X_1|X_2=x_2} = \sqrt{1 - \rho_{1.2}^2} \, \sigma_1 \approx 0.819$$
 (20)

类似地,如图 18 所示不管 x_2 怎么变,这个条件<mark>标准差</mark>为定值。

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

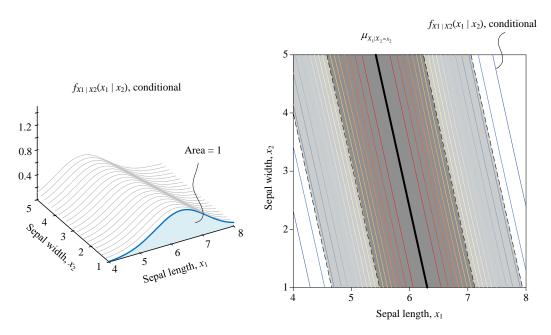


图 $18. f_{X1|X2}(x_1|x_2)$ 条件 PDF 密度三维等高线和平面等高线,不考虑分类

以鸢尾花为例,考虑标签

换个条件来看,如图 19 所示,给定鸢尾花分类条件,假设花萼宽度服从高斯分布。请大家自行计算给定鸢尾花分类为条件,花萼宽度的条件期望 $E(X_2 | Y = C_k)$ 、条件<mark>方差</mark> $var(X_2 | Y = C_k)$ 。

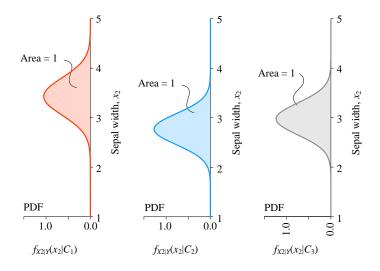


图 19. 给定鸢尾花标签 Y,花萼宽度的条件期望 $E(X_2 \mid Y = C_k)$ 、条件方差 $var(X_2 \mid Y = C_k)$,离散随机变量

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

12.4 多元正态条件分布:引入矩阵运算

本节利用矩阵运算讨论多元正态条件分布。

多元高斯分布

如果随机变量向量 χ 和 γ 服从多维高斯分布:

$$\begin{bmatrix} \chi \\ \gamma \end{bmatrix} \sim N \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{\chi} \\ \mu_{\gamma} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Sigma_{\chi\chi} & \Sigma_{\chi\gamma} \\ \Sigma_{\chi\chi} & \Sigma_{\gamma\gamma} \end{bmatrix}$$
 (21)

其中, χ 为随机变量 X_i 构成的列向量, γ 为随机变量 Y_j 构成的列向量:

$$\chi = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_D \end{bmatrix}, \quad \gamma = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_M \end{bmatrix}$$
 (22)

图 20 所示为多元高斯分布的均值向量、协方差矩阵形状。

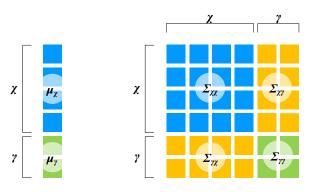


图 20. 均值向量、协方差矩阵形状

互协方差矩阵

注意, Σ_{rx} 的转置为 Σ_{xr} :

$$\left(\boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\chi}\right)^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\Sigma}_{\chi\gamma} \tag{23}$$

 Σ_{xy} 也叫互协**方差**矩阵 (cross-covariance matrix),这是下一章要讨论的内容之一。

给定 $\chi = x$ 的条件

给定 $\chi = x$ 的条件下, γ 服从如下多维高斯分布:

$$\left\{ \gamma \left| \chi = X \right. \right\} \sim N \left(\underbrace{\Sigma_{\gamma \chi} \Sigma_{\chi \chi}^{-1} \left(x - \mu_{\chi} \right) + \mu_{\gamma}}_{\text{Expectation}}, \underbrace{\Sigma_{\gamma \gamma} - \Sigma_{\gamma \chi} \Sigma_{\chi \chi}^{-1} \Sigma_{\chi \gamma}}_{\text{Variance}} \right)$$
(24)

也就是说,如图 21 所示,给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的期望值为:

$$\boldsymbol{\mu}_{\gamma|\chi=x} = \boldsymbol{\Sigma}_{\gamma\chi} \boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_{\chi}) + \boldsymbol{\mu}_{\gamma}$$
 (25)

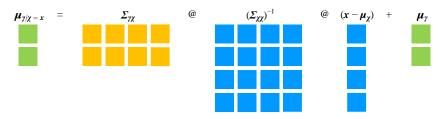


图 21. 给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的期望值的矩阵运算

如图 22 所示,给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的**方差**为:

$$\Sigma_{\gamma|\chi=x} = \Sigma_{\gamma\gamma} - \Sigma_{\gamma\chi} \Sigma_{\chi\chi}^{-1} \Sigma_{\chi\gamma}$$
 (26)

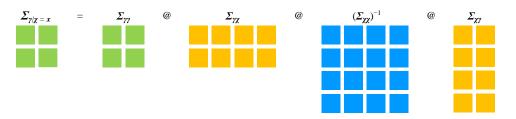


图 22. 给定 $\chi = x$ 的条件下 γ 的<mark>方差</mark>的矩阵运算

给定 $\gamma = y$ 的条件

同理,给定 $\gamma = y$ 的条件下 χ 服从如下多维高斯分布:

$$\left\{ \chi \middle| \gamma = y \right\} \sim N \left(\underbrace{\sum_{\chi \gamma} \Sigma_{\gamma \gamma}^{-1} \left(y - \mu_{\gamma} \right) + \mu_{\chi}}_{\text{Expectation}}, \underbrace{\sum_{\chi \chi} - \sum_{\chi \gamma} \Sigma_{\gamma \gamma}^{-1} \Sigma_{\gamma \chi}}_{\text{Variance}} \right)$$
(27)

即给定 $\gamma = y$ 的条件下 χ 的期望值为:

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

$$\boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\chi}|\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\chi}\boldsymbol{\gamma}} \boldsymbol{\Sigma}_{\boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{\gamma}}^{-1} \left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\gamma}} \right) + \boldsymbol{\mu}_{\boldsymbol{\chi}}$$
 (28)

给定 $\gamma = y$ 的条件下 χ 的**方差**为:

$$\Sigma_{\gamma|\gamma=\gamma} = \Sigma_{\gamma\gamma} - \Sigma_{\gamma\gamma} \Sigma_{\gamma\gamma}^{-1} \Sigma_{\gamma\gamma} \tag{29}$$

单一因变量

特别地, γ 只有一个随机变量 Y 时,这对应线性回归中有多个自变量,只有一个因变量,如图 23 所示。

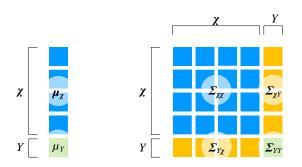


图 23. 均值向量、协方差矩阵形状, γ 只有一个随机变量

这种情况下,给定 $\chi = x$ 条件下Y的条件期望为:

$$\mu_{Y|\chi=x} = \Sigma_{Y\chi} \Sigma_{\chi\chi}^{-1} (x - \mu_{\chi}) + \mu_{Y}$$
(30)

(30) 对应多元线性回归。图 24 对应矩阵运算示意图。

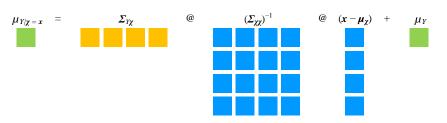


图 24. 给定 $\chi = x$ 条件下 Y 的条件期望

多元线性回归

不考虑常数项系数,如果是行向量表达的话,多元线性回归的系数b为:

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_D \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}_{Y\chi} \boldsymbol{\Sigma}_{\chi\chi}^{-1}$$
(31)

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 25 所示为 b 的矩阵运算。

常数项 b₀ 为:

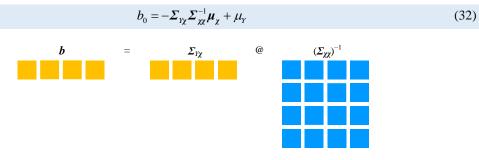


图 25. 计算多元回归的系数 b

简单线性回归

更特殊地,当 χ 和 γ 都只有一个随机变量时,即单一自变量X、单一因变量Y:

$$\mu_{Y|X=x} = \text{cov}(X,Y)(\sigma_X^2)^{-1}(x-\mu_X) + \mu_Y = \rho_{X,Y}\frac{\sigma_Y}{\sigma_X}(x-\mu_X) + \mu_Y$$
(33)

这和本书之前的(8)完全一致。本书第24章将接续讨论这一话题。

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