各种熵的理解

理解概率分布函数和概率密度函数

如果微积分是研究变量的数学，那么概率论与数理统计是研究随机变量的数学

研究一个随机变量，不只是要看它能取哪些值，更重要的是它取各种值的概率如何！

概率分布函数是描述随机变量取值分布规律的数学表示。对于任何实数x，事件[X < x]的概率当然是一个x的函数，则有 F(x) = P(X < x),其中$F(-\infty)=0, F(\infty)=1$,称 F(x)为随机变量X的分布函数。

常见的离散型随机变量分布模型有 "0-1分布","二项式分布“，”泊松分布“；连续型随机变量分布有”均匀分布”，“正态分布”。

变量类型	概率函数(某个值的概率用函数表示)	概率分布函数
离散型随机变量	$p_i = P(X=x_i) = \frac{1}{8}$ $\sum_{i=0}^{n} p_i = 1$	$F(x) = \sum_{x_i<n} p_i$
连续型随机变量	$f(x) = F'(X)$ $f(x) \geq 0, \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx = 1$	$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)\,dx$

离散型概率分布(重点在分布即可能取的所有值)：

X(取值)	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**
P(取值的概率)	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6

关于概率分布的描述角度：

1> 期望，反映随机变量平均取值的大小即从总体来看X带概率的平均值，$E(X) = \sum_{k=1}^{\infty} x_k p_k$,
$E(x) = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x)\,dx$

2>方差，度量随机变量和其数学期望之间的偏离程度。$D(X) = \sum_{i=1}^{n} p_i (x_i - \mu)^2, \mu = E(X)$;
$D(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu)^2 f(x)\,dx, \mu = E(X)$

3>熵，随机变量不确定性的描述，不确定性越大，熵越大。$H(X) = -\sum_{i=1}^{n} p(x_i) log p(x_i)$

熵(Entropy)

熵衡量不确定性的度量，熵越大，不确定性越大。可以从信息量的角度来理解。假设需要表示 8 个数字，则需要 $log_2 8 = 3$个二进制来表示，如果是其他进制则是 $log_n 8 = m$。m个这样的位来表示。$-log_2 p(x_i) = log_2 \frac{1}{p(x_i)}$, 表示的含义是这个概率需要用多少个二进制来表示也即信息量，所需要信息里越多，表示它的不确定性就越大。

信息量的概率分布：

X(取值)	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**
P的信息量	$-log_2 \frac{1}{6}$	$-log_2 \frac{1}{6}$	$-log_2 \frac{1}{6}$	$-log_2 \frac{1}{6}$	$-log_2 \frac{1}{6}$
P(取值的概率)	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6

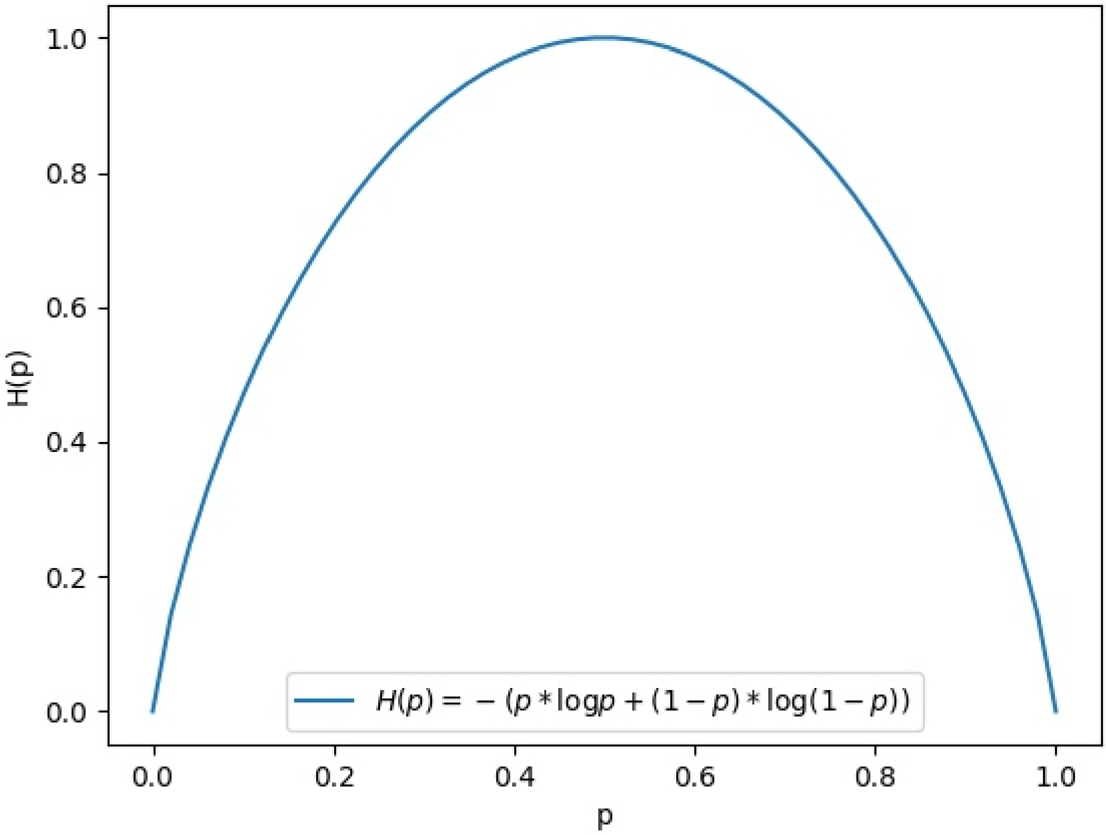
$H(X) = -\sum_{i=1}^{n} p(x_i) log p(x_i)$,所以熵的公式也可以理解成发生事件所带来的信息量的期望，信息量越大，不确定性越大,它从整体上描述不确定性，而不是单纯概率大小比较。

例如：有硬币A，硬币B，A发生正面概率为P_A = 0.9, 反面概率P_a=0.1 ，B发生的正面概率为P_B=0.5,反面概率为P_b =0.5,

问：哪枚硬币比较可能出现正面？ 硬币 A ，因为 P_A = 0.9 > P_B = 0.5， 直觉是A容易发生，比较确定

问：哪枚硬币比较可能出现反面？ 硬币 B ，因为 P_a = 0.1 < P_b = 0.5, 直觉是B容易发生, 它只是某个事件的概率而不是整体描述。

而从函数图像可见，硬币 B 的熵比硬币A的大，硬币B的不确定性最大, 概率越均匀，不确定性越大



$$0 \leq -\sum_{i=1}^{n} p(x_i) \log p(x_i) \leq \log n$$

$$\text{证明(拉格朗日乘子法)}：L(p(x_i), p(x_2), \ldots, p(x_n), \lambda) = -\sum_{i=1}^{n} p(x_i) logp(x_i) + \lambda(p(x_i) + p(x_2), \ldots, p(x_n) - 1)$$

$$\frac{\delta L}{\delta p(x_i)} = -\log p(x_i) - 1 + \lambda$$

$$\text{设：}\frac{\delta L}{\delta p(x_i)} = 0$$

$$-\log p(x_i) - 1 + \lambda = 0$$

$$p(x_i) = e^{\lambda-1}$$

$$n(e^{\lambda-1}) = 1$$

$$p(x_i) = \frac{1}{n}$$

$$-\sum_{i=1}^{n} p(x_i) \log p(x_i) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{n} \log \frac{1}{n}$$

$$= \log n$$

```python
# coding: utf-8
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
def binary_entropy(p, epslion=1e-10):
    return -(p * np.log2(p + epslion) + (1 - p) * np.log2(1 - p + epslion))
p = np.linspace(0, 1, 50)
entropy = binary_entropy(p)

plt.figure()
plt.plot(p, entropy,label="$H(p)=-(p*\logp + (1-p)*\log(1-p))$")
plt.xlabel('p')
plt.ylabel('H(p)')
plt.legend()
plt.savefig('./EntropyFunctionShow.jpg')
plt.show()
```

联合熵

假设有硬币A，B ，正面发生的概率分别为p_A, p_B, 则 A 与 B 的联合概率分布为：

取值	正，正	正，反	反，正	反，反
概率	$p_A * p_B$	$p_A * (1-p_B)$	$(1-p_A) * p_B$	$(1-p_A) * (1-p_B)$

按熵的定义：$H(X,Y) = -\sum_{x,y} p(x,y) logp(x,y)$

从直观上来理解，一个变量概率分布，引入加一个变量概率，等于引入了另一份不确定性，所以应该会有 H(X) $\leq$ H(X,Y), 假设 Y 的概率如果是 1 或者是 0 ， 可以理解成Y已经确定了, H(X) = H(X,Y)。那为什么不是 $H(X) \geq H(X,Y)$ ，只要证明 $H(X,Y) - H(X) \geq 0$

证明：

$$
\begin{aligned}
H(X,Y) - H(X) &= -\sum_{x,y} p(x,y) logp(x,y) - (-\sum_{x} p(x) \log p(x)) \\
&= -\sum_{x,y} p(x,y) logp(x,y) - (-\sum_{x,y} p(x,y) \log p(x)), X\text{的边缘分布} p(x) = \sum_{y} p(x,y) \\
&= -\sum_{x,y} p(x,y) logp(x,y) + \sum_{x,y} p(x,y) \log p(x) \\
&= -\sum_{x,y} p(x,y) (\log p(x,y) - \log p(x)) \\
&= -\sum_{x,y} p(x,y) (\log \frac{p(x,y)}{p(x)}) \\
&= -\sum_{x,y} p(x,y) (\log p(y|x))
\end{aligned}
$$

$$
0 \leq -\log p(x), \text{则} \ -\sum_{x,y} p(x,y) (\log p(y|x)), \text{即} \ H(X,Y) - H(X) \geq 0
$$

条件熵(Conditional Entropy)

条件熵 $H(Y|X)$ 表示随机变量X确定的条件下，随机变量Y的不确定性，也可以理解成X给定的条件下 Y的条件概率分布的熵对X的期望，也可以理解成随机变量X在引入随机变量Y后所带来的不确定性。

例如：有2枚硬币A，B，在B硬币为正面时，A为正的概率为 P(A|b) = 0.8,则 A为反面的概率为 P(a|b) = 0.2 , 即当B取某个值时，与A的取值就会形成一个概率分布，是概率分布就应该有熵如图：

Y	正面	反面
X = b(反面)	p(A|b)	p(a|b)

当 X = b 时，形成的概率分布，则它的熵是 $H(Y|X=b)$其中 P(X = b) 也是一个概率

Y	正面	反面
X = B(正面)	p(A|B)	p(a|B)

当 X = B 时，形成的概率分布，则它的熵是 $H(Y|X=B)$其中 P(X = B) 也是一个概率

所以条件熵的定义为:

$$\begin{aligned}
H(Y|X) &= \sum_{i=1}^{N} p(x_i)H(Y|X=x_i), \text{其中}N\text{为}X\text{可取的值} \\
&= \sum_{i=1}^{N} p(x_i)(-\sum_{j=1}^{M} p(y_j|x_i)\log p(y_j|x_i)) \\
&= -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} p(x_i)p(y_j|x_i)\log p(y_j|x_i), \text{由于}p(x_i)\text{与后一个求和无关，所以前移不影响} \\
&= -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{M} p(x_i, y_i)\log p(y_j|x_i) \\
&= -\sum_{x,y} p(x,y)\log p(y|x)
\end{aligned}$$

与前面联合熵的推导对比发现：

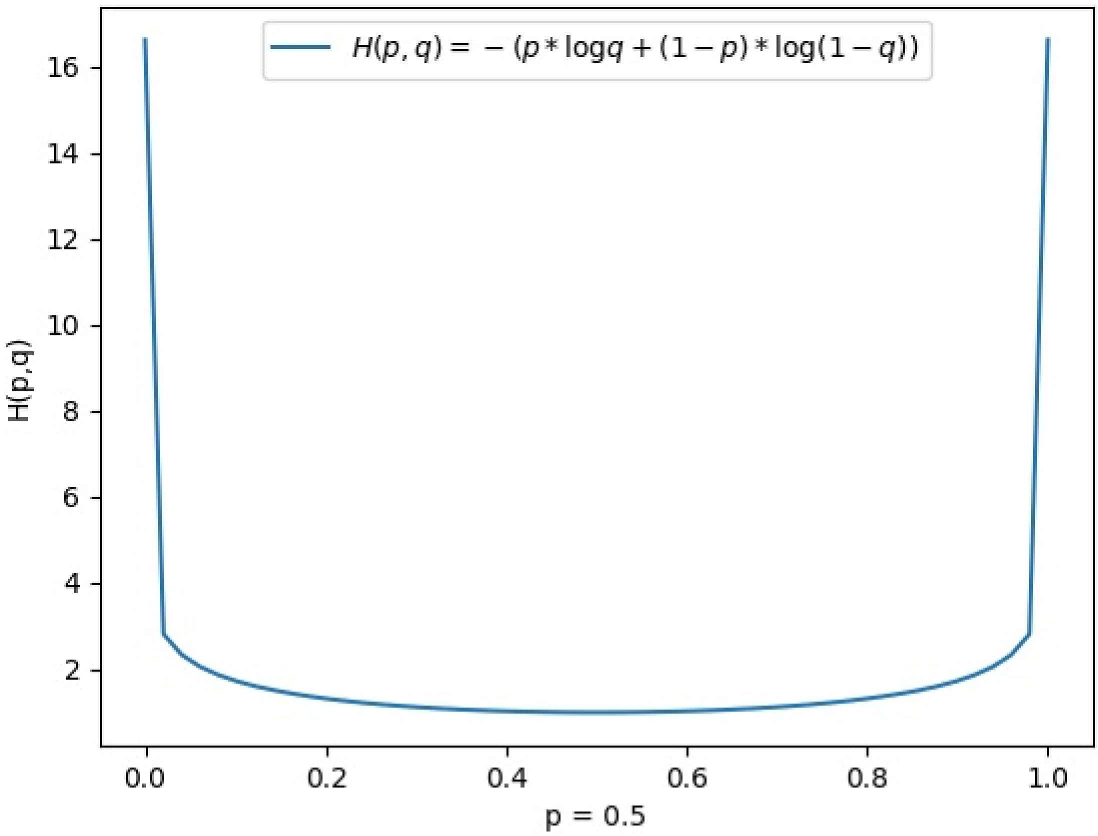
$$\begin{aligned}
H(X,Y) - H(X) &= H(Y|X) \\
&= -\sum_{x,y} p(x,y)\log p(y|x)
\end{aligned}$$

交叉熵(Cross Entropy)

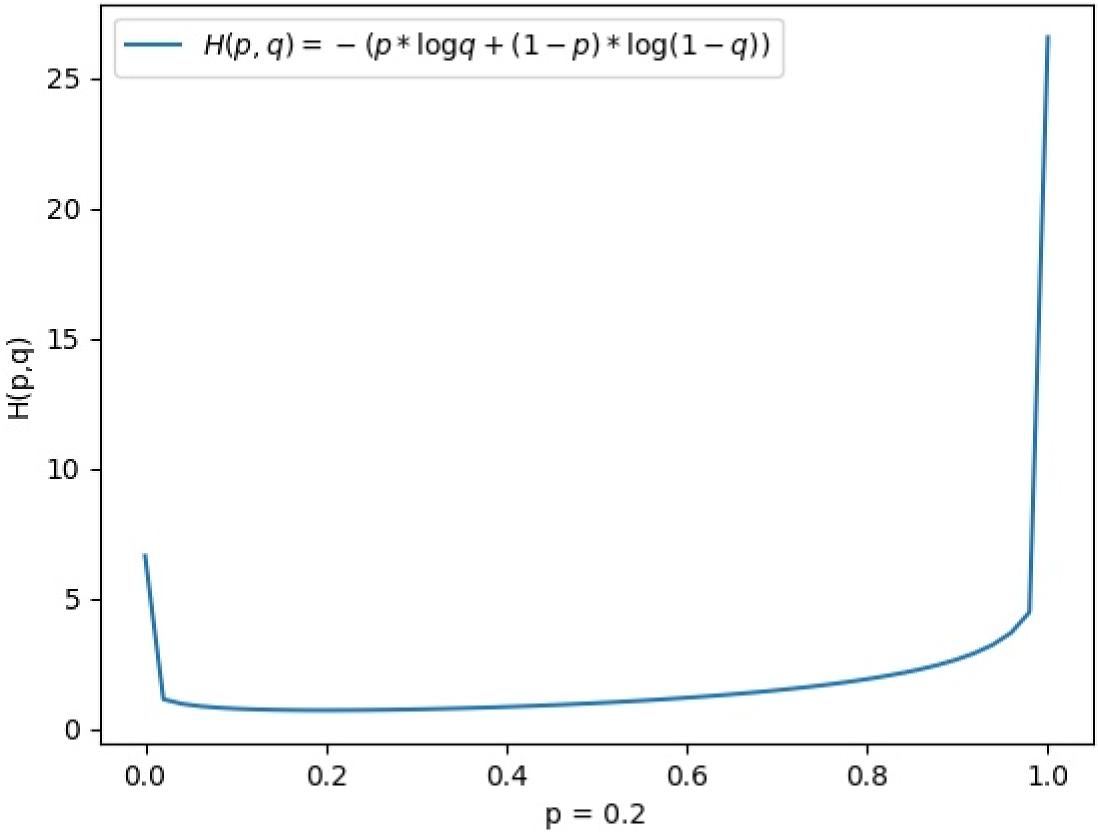
设有样本集的两个概率分布$p(x)$和 $q(x)$,其中 $p(x)$ 为真实分布，$q(x)$ 为非真实分布[可以理解成训练分布]，则有交叉熵为：

$$H(p,q) = -\sum_{x} p(x)\log q(x)$$

它表示的是非真实分布q(x)的不确定性在真实分布概率下的平均不确定性，描述了真实分布与非真实分布的关系，即q(x)不断逼近 p(x)时，值越小，当远离时，值越大。



$H(p,q) = -(p * \log q + (1-p) * \log(1-q))$
16
14
12
10
8
6
4
2
H(p,q)
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
p = 0.5




```
# coding: utf-8
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
p = 0.2
def binary_entropy(q, epslion=1e-10):
    return -(p * np.log2(q + epslion) + (1 - p) * np.log2(1 - q + epslion))
q = np.linspace(0, 1, 50)
entropy = binary_entropy(q)

plt.figure()
plt.plot(q, entropy,label="$H(p,q)=-(p*\logq + (1-p)*\log(1-q))$")
plt.xlabel('p = 0.2')
plt.ylabel('H(p,q)')
plt.legend()
plt.savefig('./CrossEntropyFunctionShow0.2.jpg')
plt.show()
```

从函数图像上可以发现，当 q(x) 越接近p(x) 时，交叉熵值越小，利用这一特性，使用场景有交叉熵损失函数。

相对熵(Relative Entropy),也称为KL散度(Kullback-Leibler divergence)

从直觉上来看，当 q(x) 越接近 p(x) 交叉熵越小，是否可以说明，p(x) 本身的熵要比交叉熵小？

$$
\begin{aligned}
H(p,q)-H(p) &= -\sum_x p(x)\log q(x)-(-\sum_x p(x)\log p(x)) \\
&= \sum_x p(x)\log p(x)-\sum_x p(x)\log q(x) \\
&= \sum_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)} \\
&= D_{KL}(p||q)
\end{aligned}
$$

设 p(x),q(x) 是离散型随机变量X中取值的两个概率分布，则 p 对 q 的相对熵是:

$$D_{DL}(p||q)=\sum_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)}$$

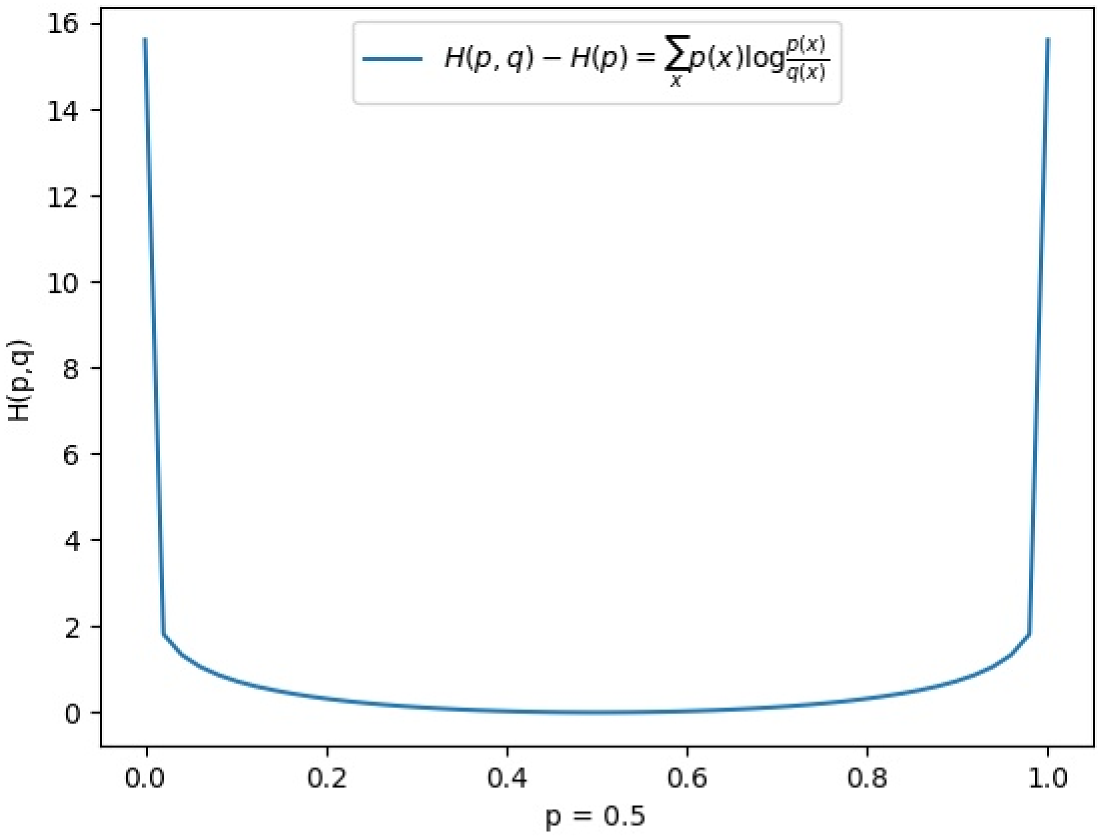
性质：

1. 如果 p(x) 和 q(x) 两个分布相同时，那么相对熵等于 0.
2. $D_{KL}(p||q)\neq D_{KL}(q||p)$, 相对熵具有不对称性。
3. $D_{KL}(p||q)\geq 0$

证明：$D_{KL}(p||q)\geq 0$

$$
\begin{aligned}
D_{KL}(p||q) &= \sum_x p(x)\log\frac{p(x)}{q(x)} \\
&= -\sum_x p(x)\log\frac{q(x)}{p(x)}, Jensen\text{不等式，} E(f(x))\geq f(E(x)),\text{这里的}f\text{为}\log\text{函数} \\
&\geq -\log E(\frac{q(x)}{p(x)}) \\
&= -\log\sum_x p(x)\frac{q(x)}{p(x)} \\
&= -\log\sum_x q(x) \\
&= 0, \sum_x q(x)=1
\end{aligned}
$$

关于相对熵的函数图像，从 $-\sum_x p(x)\log q(x)-(-\sum_x p(x)\log p(x))$,可以看出当p(x)确定后，$D_{KL}(p||q)$ 只与 q(x) 相关，所以函数与条件熵形状类似。




```
# coding: utf-8
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
p = 0.5
def binary_entropy(q, epslion=1e-10):
    return +(p * np.log2(p + epslion) + (1 - p) * np.log2(1 - p + epslion))-(p * np.log2(q + epslion) + (1 - p) * np.log2(1 - q + epslion))
#概率取值
q = np.linspace(0, 1, 50)
entropy = binary_entropy(q)

plt.figure()
plt.plot(q, entropy,label=r"$H(p,q)-H(p)=\sum_{x}p(x)\log{\frac{p(x)}{q(x)}}$")
plt.xlabel('p = 0.5')
plt.ylabel('H(p,q)')
plt.legend()
plt.savefig('./RelativeEntropyFunctionShow.jpg')
plt.show()
```

相对熵(散度)描述的是交叉熵与信息熵的距离，也就是非真实分布逼近真实分布的程度的度量。

交叉熵损失函数

$$H(p,q)=-\sum_{x}p(x)\log q(x)$$

对于逻辑回归：

$$h_\theta(x)=\frac{1}{1+e^{-\theta^T x}}$$

则

$$\begin{aligned}
P(y=1|x;\theta)&=h_\theta(x)\\
P(y=0|x;\theta)&=1-h_\theta(x)\\
p(y|x;\theta)&=(h_\theta(x))^y(1-h_\theta(x))^{1-y},\text{写成统一形式}\\
L(\theta)&=\prod_{i=1}^{m}p(y^{(i)}|x^{(i)};\theta),\text{根据最大似然函数}\\
&=\prod_{i=1}^{m}(h_\theta(x^{(i)}))^{y^{(i)}}(1-h_\theta(x^{(i)}))^{1-y^{(i)}}\\
l(\theta)&=\log L(\theta),\text{两边取对数}\\
&=\sum_{i=1}^{m}y^{(i)}\log h_\theta(x^{(i)})+(1-y^{(i)})\log(1-h_\theta(x^{(i)})),\text{最终求极大值，前面加负数时就是最小值}
\end{aligned}$$

逻辑回归属于二分类，对于每一个样本，要么 $y^{(i)}=1$，要么 $y^{(i)}$ =0

当 $y^{(i)}=1$ 时，可以理解它的概率分布为：

$y^{(i)}$	**1**	**0**
真实概率	1	0
使用y表示	$y^{(i)}$	$1-y^{(i)}$
预测概率	$h_\theta(x^{(i)})$	$1-h_\theta(x^{(i)})$

则根据最交叉熵定义：

$$\begin{aligned}
H(p,q)&=-\sum_x p(x)\log q(x),\text{针对一个样本的概率分布}\\
&=-(1*\log(h_\theta(x))+0*\log(1-h_\theta(x)))\\
&=-(y*\log(h_\theta(x))+(1-y)*\log(1-h_\theta(x)))
\end{aligned}$$

对比发现，利用最大似然函数和利用最小交叉熵得出的损失函数是一样的，这就说明为什么交叉熵损失函数能够使得真实分类的概率最大，而其他概率最小，

因为非真实概率不断逼近真实概率时，交叉熵会越小，同理可以推导到多分类。

参考自：

条件熵理解：https://zhuanlan.zhihu.com/p/26551798

公式推导：https://www.cnblogs.com/kyrieng/p/8694705.html

直接理解熵：https://www.jianshu.com/p/09b70253c840