

# 8

## Conditional Expectation and Variance

# 条件概率

离散、连续随机变量的条件期望、条件方差



每一种科学，只要达到一定程度的成熟，就会自动成为数学的一部分。

*Every kind of science, if it has only reached a certain degree of maturity, automatically becomes a part of mathematics.*

—— 大卫·希尔伯特 (David Hilbert) | 德国数学家 | 1862 ~ 1943



```
matplotlib.pyplot.errorbar() 绘制误差棒
matplotlib.pyplot.stem() 绘制火柴梗图
numpy.mean() 计算均值
numpy.sqrt() 计算平方根
numpy.std() 计算标准差，默认分母为 n，不是 n - 1
numpy.var() 计算方差，默认分母为 n，不是 n - 1
seaborn.heatmap() 绘制热图
```

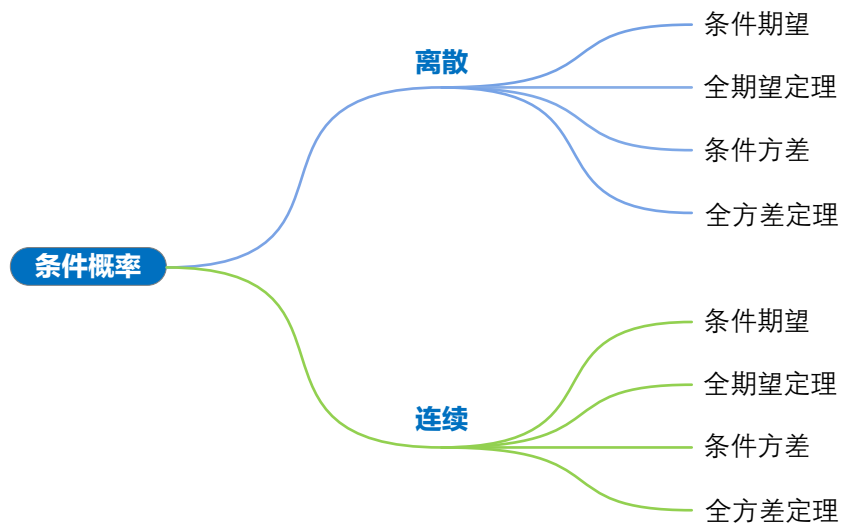
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

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

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

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



## 8.1 离散随机变量：条件期望

条件**期望** (conditional expectation 或 conditional expected value)，或条件**均值** (conditional mean)，是一个随机变量的相对于一个条件概率分布的**期望**。换句话说，这是给定的一个或多个其他随机变量值的条件下，某个特定随机变量的**期望**。

类似地，条件**方差** (conditional variance) 与一般**方差**的定义几乎一致。计算条件**方差**时，只不过将**期望**换成了条件**期望**，并将概率换成了条件概率而已。

条件**期望**和条件**方差**这两个概念在数据科学、机器学习算法中格外重要，本章分别讲解离散随机变量和随机变量的条件**期望**和条件**方差**。



本书第 12 章则专门介绍高斯条件概率。

大家应该已经看到，本章**期望**、**方差**交替出现，为了帮助大家阅读，我们用给**期望**、**方差**涂了不同颜色。

### 什么是条件期望？

条件**期望**其实很好理解。比如，一个笼子里 10 只动物，其中 6 只鸡 (60%)、4 只兔 (40%)。如图 1 所示，分别只考虑鸡，只考虑兔，这就是“条件”。

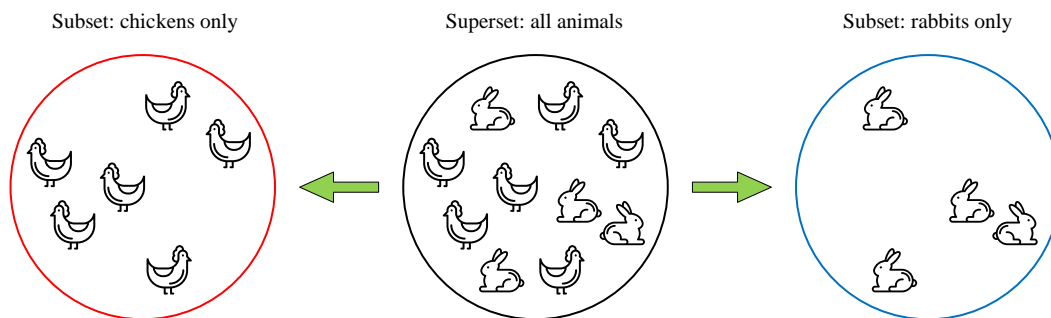


图 1. 解释条件

如图 2 所示，鸡的平均体重为 2 公斤，这个数值就是条件**期望**。再举个例子，兔子的平均体重为 4 公斤，这也是条件**期望**。

本书后续会用鸢尾花数据做例子给大家继续讲解条件**期望**。

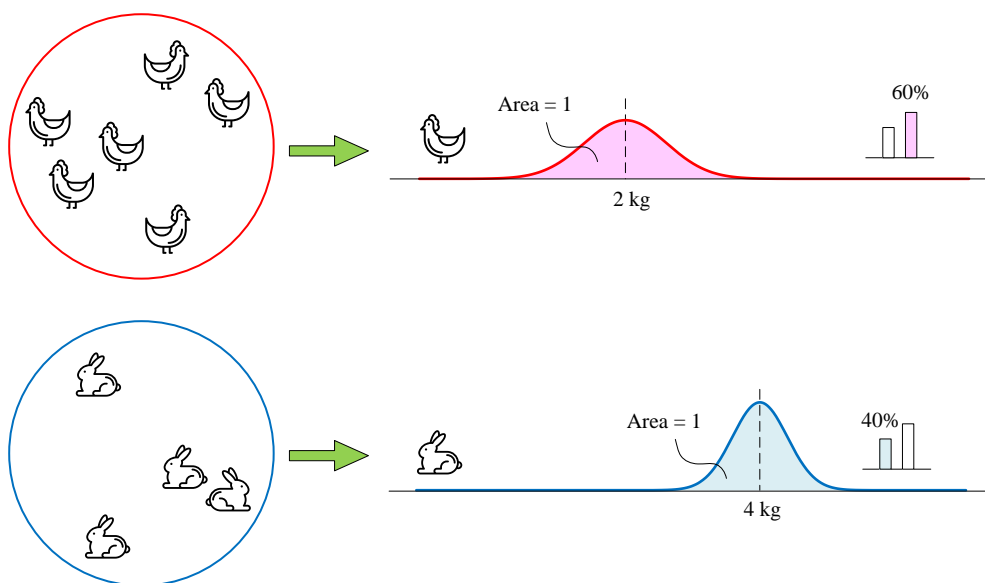


图 2. 解释条件期望

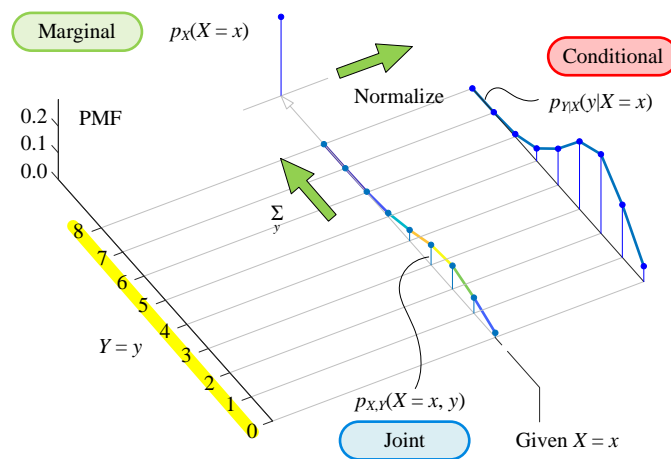
### 条件期望 $E(Y|X=x)$

如果  $X$  和  $Y$  均为离散随机变量，给定  $X=x$  条件下， $Y$  的条件期望  $E(Y|X=x)$  (conditional mean of  $Y$  given  $X=x$ ) 定义为：

$$\begin{aligned}
 E\left(\underbrace{Y}_{\text{Given}} \middle| X=x\right) &= \underbrace{\sum_{\mathbf{y}} \mathbf{y} \cdot p_{Y|X}(\mathbf{y}|x)}_{\text{Expectation}} \\
 &= \sum_{\mathbf{y}} \underbrace{\mathbf{y} \cdot \frac{p_{X,Y}(x,\mathbf{y})}{p_X(x)}}_{\text{Joint}} = \frac{1}{\underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}}} \sum_{\mathbf{y}} \underbrace{\mathbf{y} \cdot p_{X,Y}(x,\mathbf{y})}_{\text{Joint}}
 \end{aligned} \tag{1}$$

(1) 相当于求加权平均数。

从几何角度来看，如图 3 所示，条件概率质量函数  $p_{Y|X}(y|x)$  分别乘以对应  $y$  值 (绿色高亮)，然后求和，结果就是条件期望  $E(Y|X=x)$ 。

图 3. 条件概率 PMF  $p_{Y|X}(y|x)$ ,  $X$  和  $Y$  均为离散随机变量

### 解剖条件期望 $E(Y|X=x)$

下面，我们进一步解剖 (1)。

给定  $X=x$  条件下，也就是说离散随机变量  $X$  固定在  $x$ ，满足这个条件的样本构成了全新的“样本空间”。

$p_{Y|X}(y|x)$  是给定  $X=x$  条件下  $Y$  的概率质量函数，相当于 (1) 中加权平均数中的权重。

回忆本书第 4 章，利用贝叶斯定理， $p_X(x) > 0$ ，条件概率质量函数  $p_{Y|X}(y|x)$  可以通过联合 PMF  $p_{X,Y}(x,y)$  和边缘 PMF  $p_X(x)$  相除得到：

$$p_{Y|X}(y|x) = \frac{p_{X,Y}(x,y)}{\underbrace{p_X(x)}_{\text{Normalize}}} \quad (2)$$

其中，分母中的边缘概率  $p_X(x)$  起到归一化的效果。

(1) 中大西格玛求和  $\sum_y (\cdot)$  代表“穷举”一切可能的  $y$  值，计算“ $y \times$  条件概率  $p_{Y|X}(y|x)$ ”之和，也就是“ $y \times$  权重”之和，即加权平均数。

### 比较期望 $E(Y)$ 、条件期望 $E(Y|X=x)$

对比离散随机变量  $Y$  的期望  $E(Y)$ 、条件期望  $E(Y|X=x)$ ：

$$\begin{aligned} E(Y) &= \sum_y y \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Weight}} \\ E(Y|X=x) &= \sum_y y \cdot \underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Weight}} \end{aligned} \quad (3)$$

容易发现，我们不过是把求均值的权重从边缘 PMF  $p_Y(y)$  换成了条件 PMF  $p_{Y|X}(y|x)$ 。  
 $\sum_y$  都是遍历所有  $y$  的取值。

作为权重， $p_Y(y)$  和  $p_{Y|X}(y|x)$  的求和都为 1，即：

$$\begin{aligned} \sum_y \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} &= 1 \\ \sum_y \underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} &= 1 \end{aligned} \quad (4)$$

上两式实际上都是本书第 3 章介绍的**全概率定理** (law of total probability) 的体现。

**▲ 注意**，**期望**  $E(Y)$  是一个标量值。而  $E(Y|X=x)$  在不同的  $X=x$  条件下结果不同，即  $E(Y|X)$  代表一组数。也就是说， $E(Y|X)$  可以看做是个向量。本书前文提过，求期望  $E()$  运算相当于“归纳”，降维。也就是说  $E(Y|X)$  中“ $Y$ ”已经被“压缩”成了一个数值，但是  $X$  还是可变的。

既然  $E(Y|X)$  代表一组数，我们立刻就会想到  $E(Y|X)$  肯定也有**期望**，即均值！

也就是说，笼子里的鸡的平均体重、兔子的平均体重，这两个均值还能再算一个均值，即笼子里所有动物的平均体重。

## 全期望定理

**全期望定理** (law of total expectation)，又叫**双重期望定理** (double expectation theorem)、**重叠期望定理** (iterated total expectation)，具体指的是：

$$\begin{aligned} \underbrace{E(Y)}_{\text{Expectation}} &= \underbrace{E \left[ \underbrace{E(Y|X)}_{\text{Conditional expectation}} \right]}_{\text{Expectation of conditional expectations}} = \sum_x \underbrace{E(Y|X=x)}_{\text{Conditional expectation}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \end{aligned} \quad (5)$$

推导过程如下，不要求大家记忆：

$$\begin{aligned} E \left[ \underbrace{E(Y|X)}_{\text{Conditional expectation}} \right] &= \sum_x \underbrace{E(Y|X=x)}_{\text{Conditional expectation}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} = \sum_x \left\{ \underbrace{\sum_y y \cdot p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional expectation}} \right\} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \\ &\stackrel{\text{Use Bayes' Rule}}{=} \sum_x \sum_y y \cdot \underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \stackrel{\text{Joint}}{=} \sum_x \sum_y y \cdot p_{X,Y}(x,y) \\ &\stackrel{\text{Use Bayes' Rule}}{=} \sum_x \sum_y y \cdot \underbrace{p_{X|Y}(x|y)}_{\text{Conditional}} \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} = \sum_y y \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \cdot \underbrace{\sum_x p_{X|Y}(x|y)}_{\substack{=1 \\ \text{Law of total probability}}} \\ &= \sum_y y \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} = E(Y) \end{aligned} \quad (6)$$

▲ 注意，以上推导中，二重求和调换变量顺序，这是因为  $x$  和  $y$  构成的网格“方方正正”；否则，不能轻易调换求和顺序。这和调换二重积分变量顺序类似。



《数学要素》第 14 章探讨过这个问题，请大家回顾。

## 白话说全期望定理

其实，全期望定理很好理解！

还是用本章前文的例子。前文提到，笼子里的鸡 (60%) 的平均体重 2 kg，兔子 (40%) 的平均体重为 4 kg。整个笼子里所有动物的平均体重就是  $2 \times 60\% + 4 \times 40\% = 2.8$  kg。

前文提过，2 kg、4 kg 都是都是条件期望。

2.8 kg 就是“条件期望的期望”。笼子里的鸡占比较高，因此整个笼子里动物的平均体重稍微“偏向”鸡体重的“条件期望”。

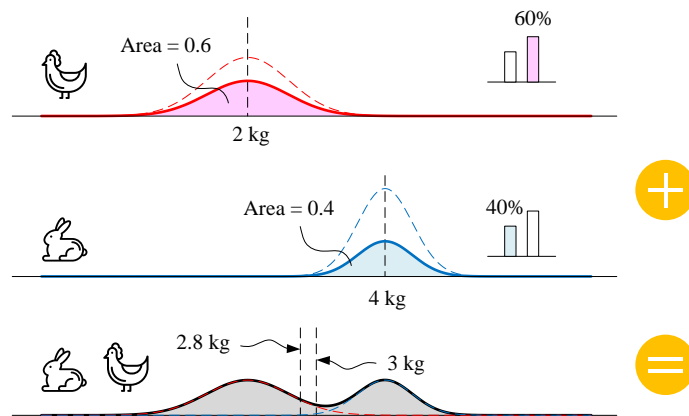


图 4. 解释全期望定理

大家如果要问，为什么求“条件期望的期望”要用加权平均？而不是用  $(2 + 4) / 2 = 3$  kg？

为了回答这个问题，我们举个极端例子来解释。除了所有鸡之外，如果整个笼子里只有一只兔子，它的体重为 8 kg，也就是说“所有”兔子的平均体重也是 8 kg。假设所有鸡的平均体重还是 2 kg。大家自己思考，如果用 2 kg 和 8 kg 的平均值 5 kg 代表整个笼子里所有动物的平均体重，这是否合理？

## 条件期望 $E(X|Y=y)$

同理，如图 5 所示，给定  $Y=y$  这个条件下， $p_Y(y) > 0$ ， $X$  的条件期望  $E(X|Y=y)$  定义为：

$$\begin{aligned}
 E\left(\underbrace{X}_{\text{Given}} \middle| Y = y\right) &= \underbrace{\sum_x \underbrace{x \cdot p_{X|Y}(x|y)}_{\text{Conditional}}}_{\text{Expectation}} \\
 &= \sum_x \underbrace{x \cdot \frac{p_{X,Y}(x,y)}{p_Y(y)}}_{\text{Joint}} = \frac{1}{\underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}}} \sum_x \underbrace{x \cdot p_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}}
 \end{aligned} \tag{7}$$

请大家自行分析上式，并比较  $E(X)$  和  $E(X|Y=y)$ ：

$$\begin{aligned}
 E(X) &= \sum_x x \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Weight}} \\
 E(X|Y=y) &= \sum_x x \cdot \underbrace{p_{X|Y}(x|y)}_{\text{Weight}}
 \end{aligned} \tag{8}$$

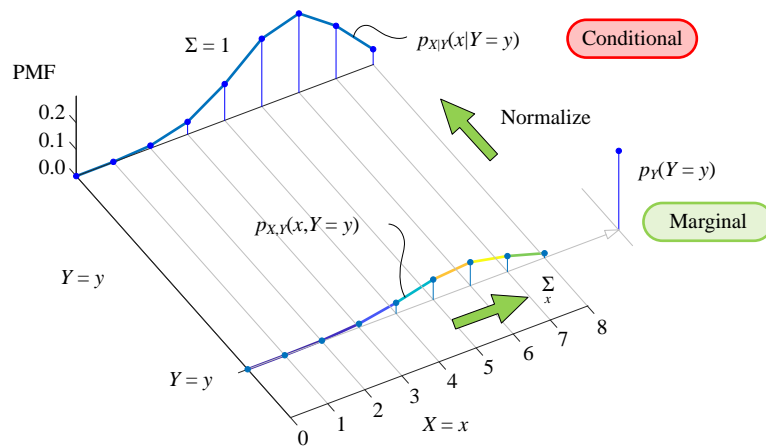


图 5. 条件概率 PMF  $p_{X|Y}(x|y)$ ,  $X$  和  $Y$  均为离散随机变量

对于条件期望  $E(X|Y)$ ，全期望定理为：

$$E(X) = E\left[\underbrace{E(X|Y)}_{\text{Conditional expectation}}\right] \tag{9}$$

## 基于事件的条件期望

给定事件  $C$  发生的条件下 ( $\Pr(C) > 0$ )，随机变量  $X$  的条件期望为：



$$\begin{aligned}
 E(X|C) &= \sum_x x \cdot \underbrace{p_{X|C}(x|C)}_{\text{Conditional}} \\
 &= \sum_x x \cdot \frac{\overbrace{p_{X,C}(x,C)}^{\text{Joint}}}{\Pr(C)}
 \end{aligned} \tag{10}$$

举个例子，事件  $C$  可以是鸢尾花数据中指定的标签。

这个式子类似前文的两个随机变量的条件期望，大家会在本章后续看到上式的用途。

## 独立

特别地，如果  $X$  和  $Y$  独立，则：

$$\begin{aligned}
 E(Y|X=x) &= E(Y) \\
 E(X|Y=y) &= E(X)
 \end{aligned} \tag{11}$$

## 8.2 离散随机变量：条件方差

在上一节的基础上，本节介绍离散随机变量的条件方差。

### 条件方差 $\text{var}(Y|X=x)$

给定  $X=x$  条件下， $Y$  的条件方差  $\text{var}(Y|X=x)$  (conditional variance of  $Y$  given  $X=x$ ) 定义为：

$$\begin{aligned}
 \text{var}(Y|X=x) &= \sum_y \left( \underbrace{y - E(Y|X=x)}_{\text{Deviation}} \right)^2 \cdot \underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} \\
 &= \sum_y \left( y - E(Y|X=x) \right)^2 \cdot \frac{\overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}}{\underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}}} \\
 &= \frac{1}{\underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}}} \sum_y \left( \underbrace{y - E(Y|X=x)}_{\text{Deviation}} \right)^2 \cdot \overbrace{p_{X,Y}(x,y)}^{\text{Joint}}
 \end{aligned} \tag{12}$$

下面解剖上式。

$E(Y|X=x)$  是 (1) 中求得的条件期望，也就是计算偏差的基准。

$y - E(Y|X=x)$  代表偏差，即每个  $y$  和  $E(Y|X=x)$  之间的偏离。 $y - E(Y|X=x)$  平方后，再以  $p_{Y|X}(y|x)$  为权重，求平均值，结果就是条件**方差**。

对比离散随机变量  $Y$  的**方差**和条件**方差**：

$$\begin{aligned}\text{var}(Y) &= \sum_y \left( \underbrace{y - E(Y)}_{\text{Deviation}} \right)^2 \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Weight}} \\ \text{var}(Y) &= \sum_y \left( \underbrace{y - E(Y|X=x)}_{\text{Deviation}} \right)^2 \cdot \underbrace{p_{Y|X}(y|x)}_{\text{Weight}}\end{aligned}\quad (13)$$

可以发现两处变差异，度量偏差的基准从  $E(Y)$  变成  $E(Y|X=x)$ 。加权平均的权重从  $p_Y(y)$  变成  $p_{Y|X}(y|x)$ 。

类似**方差**的简便计算技巧，条件**方差**  $\text{var}(Y|X=x)$  也有如下计算技巧：

$$\begin{aligned}\text{var}(Y) &= E(Y^2) - E(Y)^2 \\ \text{var}(Y|X=x) &= E(Y^2|X=x) - E(Y|X=x)^2\end{aligned}\quad (14)$$

## 全方差定理

**全方差定理** (law of total variance)，又叫**重叠期望定理** (law of iterated variance)，指的是：

$$\text{var}(Y) = \underbrace{E(\text{var}(Y|X))}_{\text{Expectation of conditional variance}} + \underbrace{\text{var}(E(Y|X))}_{\text{Variance of conditional expectation}}\quad (15)$$

$E(\text{var}(Y|X))$  是条件**方差**的**期望** (加权平均数)：

$$\underbrace{E(\text{var}(Y|X))}_{\text{Expectation of conditional variance}} = \sum_x \text{var}(Y|X=x) \cdot p_X(x)\quad (16)$$

条件**方差**的**期望**  $E(\text{var}(Y|X))$  还不够解释整体的**方差**。缺少的成分是条件**期望**的**方差**  $\text{var}(E(Y|X))$ ：

$$\underbrace{\text{var}(E(Y|X))}_{\text{Variance of conditional expectation}} = \sum_x (E(Y|X=x) - E(Y))^2 \cdot p_X(x)\quad (17)$$

根据全**期望定理**， $E(Y|X=x)$  的**期望**为  $E(Y)$ 。

换个方向思考，(15) 相当于对  $\text{var}(Y)$  的分解：

$$\begin{aligned}
 \text{var}(Y) &= \underbrace{\text{E}(\text{var}(Y|X))}_{\text{Expectation of conditional variance}} + \underbrace{\text{var}(\text{E}(Y|X))}_{\text{Variance of conditional expectation}} \\
 &= \sum_x \underbrace{\text{var}(Y|X=x)}_{\text{Deviation within a subset}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Weight}} + \sum_x \underbrace{\left( \text{E}(Y|X=x) - \text{E}(Y) \right)^2}_{\text{Deviation among all subsets}} \cdot \underbrace{p_X(x)}_{\text{Weight}}
 \end{aligned} \tag{18}$$

这方便我们理解哪些成分（子集内部、子集之间）以多大的比例贡献了整体的**方差**。

如图 6 所示，条件**方差**的**期望**解释的是子集（鸡子集、兔子集）各自内部差异。

条件**期望**的**方差**解释的是子集（鸡子集、兔子集）和母集（所有动物）之间的差异。

而代表鸡子集、兔子集就是鸡、兔各自的平均体重（条件**期望**），代表母集就是笼子里所有动物的平均体重（总体**期望**）。

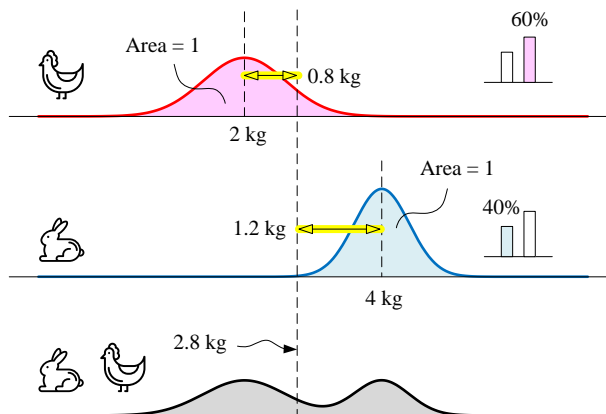


图 6. 解释全**方差**定理

比较图 6 和图 7，条件**方差**的**期望**不变，但是条件**期望**的**方差**增大。如图 7 所示，子集内部差异（**方差**）不变，如果增大子集之间的差异，也就是增大了子集和母集的差异，这会导致整体的**方差**增大。

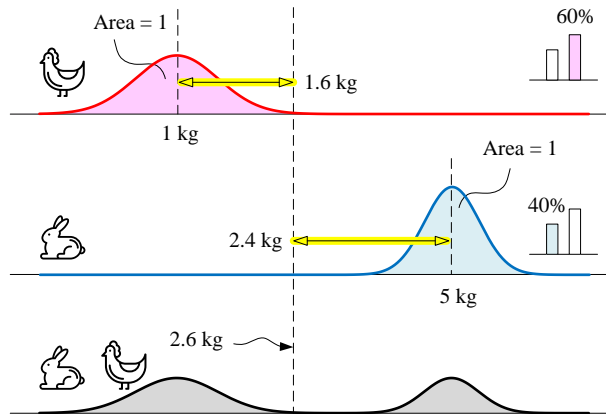


图 7. 解释全方差定理，增大子集之间差异，整体方差增大

类似全方差定理，也存在如下**全协方差定理** (law of total covariance):

$$\text{cov}(X_1, X_2) = E(\text{cov}(X_1, X_2 | Y)) + \text{cov}(E(X_1 | Y), E(X_2 | Y)) \quad (19)$$

本章不展开分析全协方差定理。

### 条件方差 $\text{var}(X|Y=y)$

给定  $Y=y$  条件下， $X$  的条件**方差**  $E(X|Y=y)$  (conditional variance of  $X$  given  $Y=y$ ) 定义为：

$$\begin{aligned} \text{var}(X|Y=y) &= \sum_{\mathbf{x}} \underbrace{\left( \underbrace{\mathbf{x} - E(X|Y=y)}_{\text{Deviation}} \right)^2}_{\text{Expectation}} \cdot \underbrace{p_{X|Y}(\mathbf{x}|y)}_{\text{Conditional}} \\ &= \sum_{\mathbf{x}} \underbrace{\left( \mathbf{x} - E(X|Y=y) \right)^2}_{\text{Joint}} \cdot \underbrace{\frac{p_{X,Y}(\mathbf{x}, y)}{p_Y(y)}}_{\text{Marginal}} \\ &= \frac{1}{p_Y(y)} \sum_{\mathbf{x}} \underbrace{\left( \mathbf{x} - E(X|Y=y) \right)^2}_{\text{Deviation}} \cdot \underbrace{p_{X,Y}(\mathbf{x}, y)}_{\text{Joint}} \end{aligned} \quad (20)$$

条件**方差**  $\text{var}(X|Y=y)$  也有如下计算技巧：

$$\text{var}(X|Y=y) = E(X^2|Y=y) - E(X|Y=y)^2 \quad (21)$$

对于随机变量  $X$ ，它的全**方差**定理为：

$$\text{var}(X) = \underbrace{E(\text{var}(X|Y))}_{\text{Expectation of conditional variance}} + \underbrace{\text{var}(E(X|Y))}_{\text{Variance of conditional expectation}} \quad (22)$$

## 8.3 离散随机变量条件期望、条件方差：以鸢尾花为例

给定花萼长度，条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$

大家已经在本书第 4 章见过图 8 中左图。这幅图给出的是条件概率  $p_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)$ 。提醒大家回忆，图中  $p_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)$  每列 PMF (即概率) 和为 1，即满足 (4)。

下面，我们试着利用图 8 中左图计算花萼长度  $X_1 = 6.5$  为条件下，条件期望  $E(X_2 | X_1 = 6.5)$ ：

$$\begin{aligned} E(X_2 | X_1 = 6.5) &= \sum_{x_2} x_2 \cdot p_{X_2|X_1}(x_2 | 6.5) \\ &= \underset{\text{cm}}{2.0 \times 0} + \underset{\text{cm}}{2.5 \times 0.19} + \underset{\text{cm}}{3.0 \times 0.65} + \underset{\text{cm}}{3.5 \times 0.16} + \underset{\text{cm}}{4.0 \times 0} + \underset{\text{cm}}{4.5 \times 0} \\ &\approx 2.984 \text{ cm} \end{aligned} \quad (23)$$

注意，上式中条件概率的结果还是 cm。

建议大家手算剩余所有  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ 。

图 8 中右上图给出的是热图  $x_2 \cdot p_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)$ ，相当于一个二元函数。

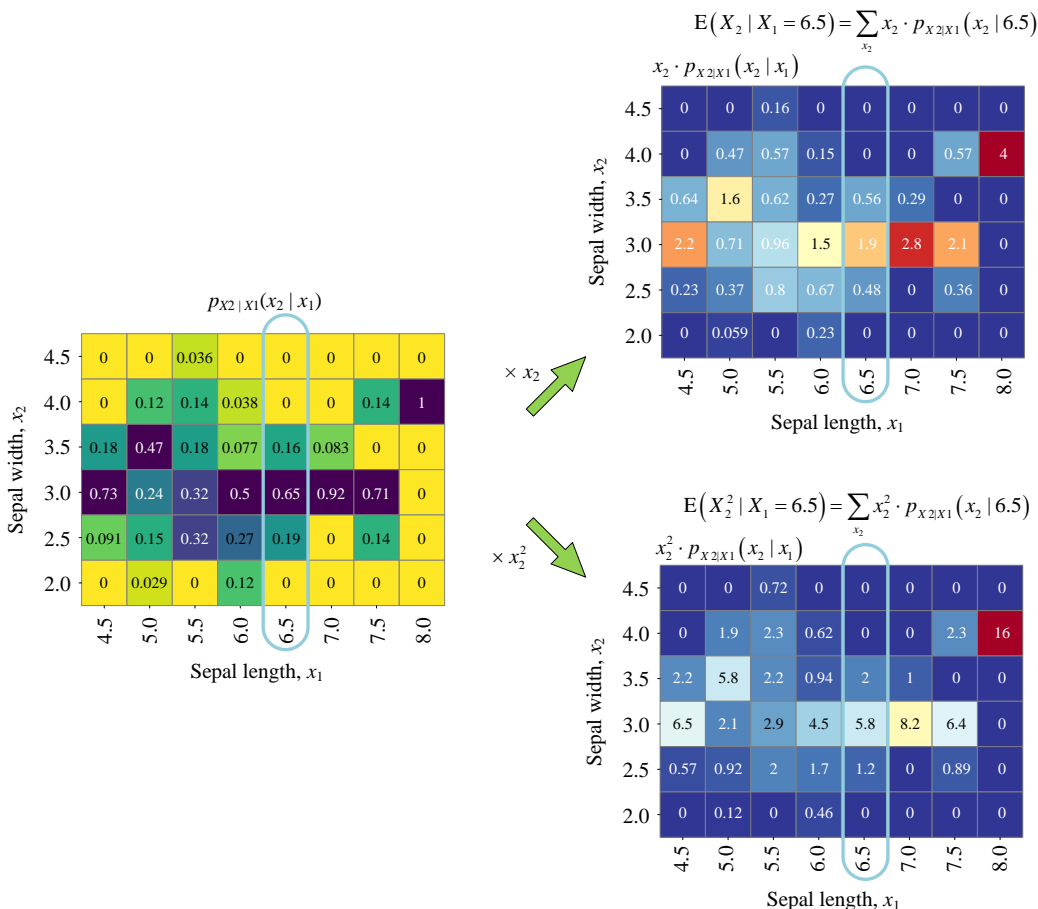
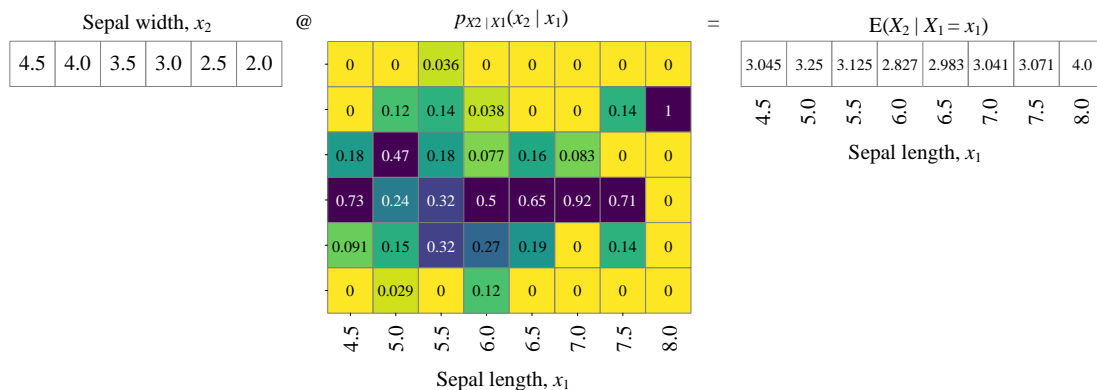
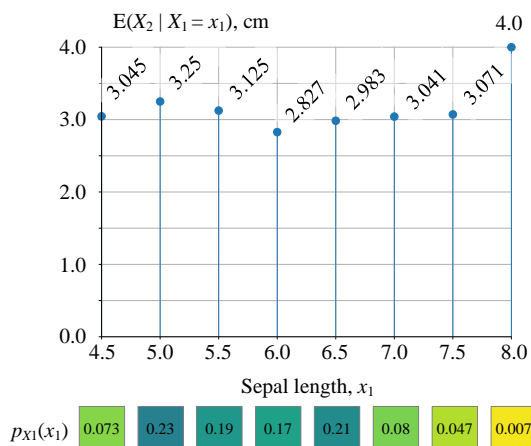


图 8. 给定花萼长度  $X_1$ , 花萼宽度  $X_2$  的条件概率  $p_{X_2/X_1}(x_2 | x_1)$  热图,  $x_2 \times p_{X_2/X_1}(x_2 | x_1)$  热图,  $x_2^2 \cdot p_{X_2/X_1}(x_2 | x_1)$  热图

图 9 所示为从矩阵乘法视角看条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$  运算。

图 10 所示为条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$  的火柴梗图。图 10 中还给出了鸢尾花花萼长度  $X_1$  的边缘 PMF  $p_{X_1}(x_1)$ 。

图 9. 矩阵乘法视角看条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ 图 10. 给定花萼长度  $X_1$ , 花萼宽度  $X_2$  的条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ , 和边缘 PMF  $p_{X_1}(x_1)$ 

根据 (5) 的全期望定理, 我们可以利用条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$  和边缘 PMF  $p_{X_1}(x_1)$  计算期望  $E(X_2)$ :

$$\begin{aligned}
 E(X_2) &= \sum_{x_1} E(X_2 | X_1 = x_1) \cdot p_{X_1}(x_1) \\
 &= \underset{\text{cm}}{3.045} \times \underset{\text{cm}}{0.073} + \underset{\text{cm}}{3.25} \times \underset{\text{cm}}{0.23} + \underset{\text{cm}}{3.125} \times \underset{\text{cm}}{0.19} + \underset{\text{cm}}{2.827} \times \underset{\text{cm}}{0.17} + \\
 &\quad \underset{\text{cm}}{2.983} \times \underset{\text{cm}}{0.21} + \underset{\text{cm}}{3.041} \times \underset{\text{cm}}{0.08} + \underset{\text{cm}}{3.071} \times \underset{\text{cm}}{0.047} + \underset{\text{cm}}{4} \times \underset{\text{cm}}{0.007} \\
 &\approx 3.063 \text{ cm}
 \end{aligned} \tag{24}$$

### 给定花萼长度，条件方差 $\text{var}(X_2 | X_1 = x_1)$

利用 (12) 计算花萼长度  $X_1 = 6.5$  为条件下，条件方差  $\text{var}(X_2 | X_1 = 6.5)$ ：

$$\begin{aligned}\text{var}(X_2 | X_1 = 6.5) &= \sum_{x_2} (x_2 - E(X_2 | X_1 = 6.5)) \cdot p_{X_2|X_1}(x_2 | 6.5) \\ &= \underbrace{(2.0 - 2.985)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{(2.5 - 2.985)^2}_{\text{cm}^2} \times 0.19 + \underbrace{(3.0 - 2.985)^2}_{\text{cm}^2} \times 0.65 + \\ &\quad \underbrace{(3.5 - 2.985)^2}_{\text{cm}^2} \times 0.16 + \underbrace{(4.0 - 2.985)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{(4.0 - 2.985)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 \\ &\approx 0.088 \text{ cm}^2\end{aligned}\quad (25)$$

条件方差  $\text{var}(X_2 | X_1 = 6.5)$  的单位为  $\text{cm}^2$ 。同样建议大家手算剩余条件方差  $\text{var}(X_2 | X_1 = x_1)$ 。

采用技巧计算，计算条件期望。首先计算花萼长度  $X_1 = 6.5$  为条件下，花萼宽度平方的期望：

$$\begin{aligned}E(X_2^2 | X_1 = 6.5) &= \sum_{x_2} x_2^2 \cdot p_{X_2|X_1}(x_2 | 6.5) \\ &= \underbrace{2.0^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{2.5^2}_{\text{cm}^2} \times 0.19 + \underbrace{3.0^2}_{\text{cm}^2} \times 0.65 + \underbrace{3.5^2}_{\text{cm}^2} \times 0.16 + \underbrace{4.0^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{4.5^2}_{\text{cm}^2} \times 0 \\ &\approx 9 \text{ cm}^2\end{aligned}\quad (26)$$

图 11 所示为花萼宽度平方值  $X_2^2$  的条件期望  $E(X_2^2 | X_1 = x_1)$  的火柴梗图。

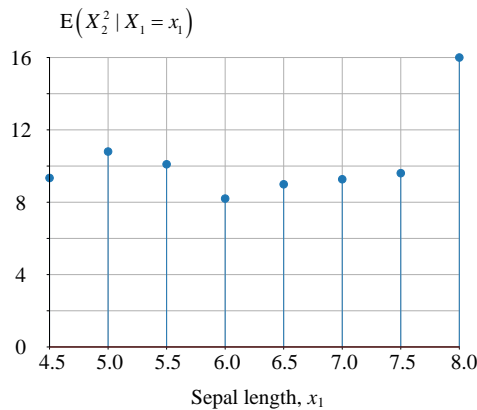


图 11. 给定花萼长度  $X_1$ ，花萼宽度平方值  $X_2^2$  的条件期望  $E(X_2^2 | X_1 = x_1)$

然后计算条件方差：

$$\text{var}(X_2 | X_1 = 6.5) = E(X_2^2 | X_1 = 6.5) - E(X_2 | X_1 = 6.5)^2 = 9 - 2.984^2 \approx 0.088 \quad (27)$$

图 12 所示为花萼长度取不同值时条件**方差**  $\text{var}(X_2 | X_1 = x_1)$  的火柴梗图，请大家用作检查自己手算结果。

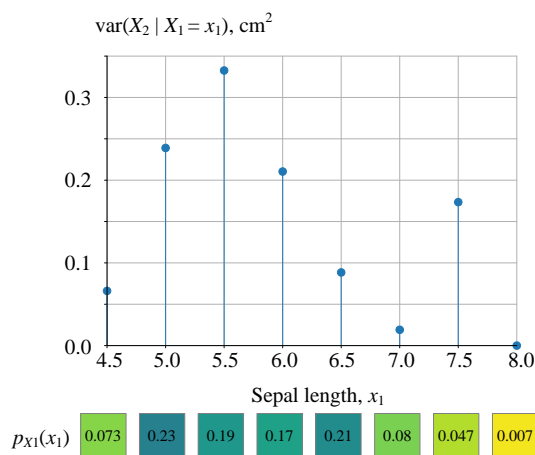


图 12. 给定花萼长度  $X_1$ ，花萼宽度的条件**方差**  $\text{var}(X_2 | X_1 = x_1)$

大家肯定早就发现，条件**期望**  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ 、条件**方差**  $\text{var}(X_2 | X_1 = x_1)$  都消去了  $x_2$  这个变量，两者仅仅随着  $X_1 = x_1$  取值变化。这也不难理解，**期望**和**方差**代表“汇总”，本质上就是“降维”。某个维度上的信息细节不再重要，我们把这个“压扁”。

压扁过程中，不同的聚合方式得到不同的统计量，比如**期望**、**方差**等等。

### 全**方差**定理：还原**方差** $\text{var}(X_2)$

根据 (17) 中给出的全**方差**定理，下面我们利用条件**方差**  $\text{var}(X_2 | X_1)$  和条件**期望**  $E(X_2 | X_1)$  计算花萼宽度的**方差**  $\text{var}(X_2)$ 。 $\text{var}(X_2)$  可以写成两部分之和：

$$\text{var}(X_2) = \underbrace{E(\text{var}(X_2 | X_1))}_{\text{Expectation of conditional variance}} + \underbrace{\text{var}(E(X_2 | X_1))}_{\text{Variance of conditional expectation}} \quad (28)$$

第一部分是条件**方差的期望**  $E(\text{var}(X_2 | X_1))$ ：

$$\underbrace{E(\text{var}(X_2 | X_1))}_{\text{Expectation of conditional variance}} = \sum_{x_1} \text{var}(X_2 | X_1 = x_1) \cdot p_{X_1}(x_1) \quad (29)$$

代入具体数值，我们可以计算得到  $E(\text{var}(X_2 | X_1))$ ：



$$\begin{aligned}
 \underbrace{E(\text{var}(X_2 | X_1))}_{\text{Expectation of conditional variance}} &= \sum_{x_1} \text{var}(X_2 | X_1 = x_1) \cdot p_{X_1}(x_1) \\
 &\approx \underbrace{0.066}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.073}_{\text{cm}^2} + \underbrace{0.238}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.226}_{\text{cm}^2} + \underbrace{0.332}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.186}_{\text{cm}^2} + \underbrace{0.210}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.173}_{\text{cm}^2} + \\
 &\quad \underbrace{0.088}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.206}_{\text{cm}^2} + \underbrace{0.019}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.08}_{\text{cm}^2} + \underbrace{0.173}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.046}_{\text{cm}^2} + \underbrace{0}_{\text{cm}^2} \times \underbrace{0.006}_{\text{cm}^2} \\
 &\approx \underbrace{0.0048}_{X_1=4.5} + \underbrace{0.0541}_{X_1=5.0} + \underbrace{0.0620}_{X_1=5.5} + \underbrace{0.0364}_{X_1=6.0} + \underbrace{0.0182}_{X_1=6.5} + \underbrace{0.0015}_{X_1=7.0} + \underbrace{0.0080}_{X_1=7.5} + \underbrace{0}_{X_1=8.0} \\
 &\approx 0.185 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{30}$$

第二部分是条件**期望**的**方差**  $\text{var}(E(X_2 | X_1))$ 。代入具体值计算得到：

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\text{var}(E(X_2 | X_1))}_{\text{Variance of conditional expectation}} &= \sum_{x_1} (E(X_2 | X_1 = x_1) - E(X_2))^2 \cdot p_{X_1}(x_1) \\
 &\approx 0.025 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{31}$$

如果大家看到这还会犯糊涂，不理解为什么  $\sum_{x_1}$  求和遍历的是  $x_1$ ？

告诉大家一个小技巧，因为  $X_2$  已经被“折叠”！不管是条件期望  $E(X_2 | X = x_1)$ 、还是期望  $E(X_2)$ ，都已经将  $X_2$  折叠成一个具体的数值，因此无法遍历。

这样  $X_2$  的方差约为：

$$\begin{aligned}
 \text{var}(X_2) &= \underbrace{E(\text{var}(X_2 | X_1))}_{\text{Expectation of conditional variance}} + \underbrace{\text{var}(E(X_2 | X_1))}_{\text{Variance of conditional expectation}} \\
 &\approx 0.185 + 0.025 = 0.211 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{32}$$

在  $\text{var}(X_2)$  中，第一部分  $E(\text{var}(X_2 | X_1))$  贡献超过 85%。而  $E(\text{var}(X_2 | X_1))$  可以进一步展开，图 13 所示为各个不同成分对花萼宽度  $X_2$  的方差  $\text{var}(X_2)$  的贡献，这也可以叫做**钻取** (drill down)。

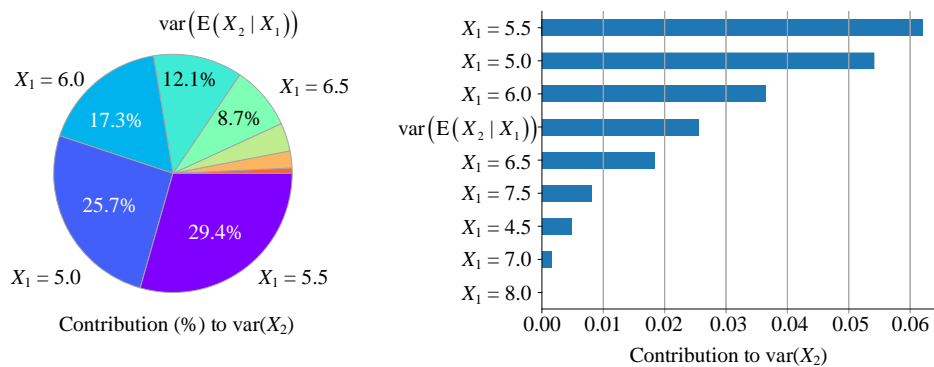


图 13. 各个不同成分对花萼宽度  $X_2$  的方差  $\text{var}(X_2)$  的贡献

### 给定花萼长度，条件**标准差** $\text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$

(25) 开方便获得条件**标准差**  $\text{std}(X_2 | X_1 = 6.5)$ :

$$\sigma_{X_2|X_1=6.5} = \text{std}(X_2 | X_1 = 6.5) = 0.295 \text{ cm} \quad (33)$$

上式的单位和鸢尾花宽度单位一致，我们便可以把条件**标准差**和图 10 画在一起，得到图 14。这幅图给出的是  $E(X_2 | X_1 = x_1) \pm \text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$ 。

圆点 ● 展示的是  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ ，即条件**期望**，代表给定  $X_1 = x_1$  条件下，鸢尾花数据在花萼宽度上的一种“预测”！这和我们讲过的回归思想本质上相同。 $E(X_2 | X_1 = x_1)$  代表当  $X_1 = x_1$  时鸢尾花萼宽度最合适的“预测”。

也就是说，回归可以看成是条件概率！本书后续还会沿着这个思路展开讨论。

而我们用**误差棒** (error bar) 展示  $\pm \text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$ ，代表给定  $X_1 = x_1$  条件下，鸢尾花数据在花萼宽上的“波动”。误差棒的宽度越大，说明波动越大；反之，则说明波动越小。

特别地，当花萼长度  $X_1$  为 8.0 cm 时，条件均**方差**  $\text{std}(X_2 | X_1 = 8.0)$  为 0。这是因为，这一处只有一个样本点。

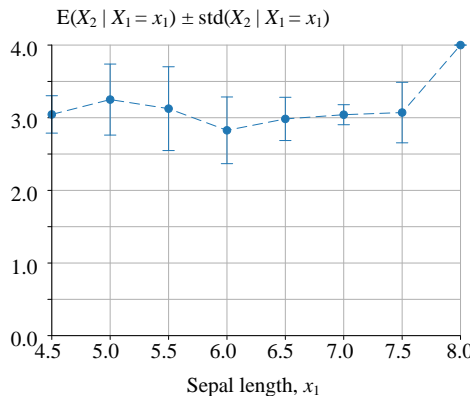


图 14. 给定花萼长度  $X_1$ ，花萼宽度  $X_2$  的条件**期望**  $E(X_2 | X_1 = x_1) \pm \text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$

### 给定花萼宽度，条件**期望** $E(X_1 | X_2 = x_2)$

图 15 给出的是条件概率  $p_{X_1|X_2}(x_1 | x_2)$ 。同样提醒大家注意图中  $p_{X_1|X_2}(x_1 | x_2)$  每行 PMF (即概率) 和为 1。

利用图 15 计算花萼宽度  $X_2 = 2.0$  为条件下，条件**期望**  $E(X_1 | X_2 = 2.0)$ :

$$\begin{aligned} E(X_1 | X_2 = 2.0) &= \sum_{x_1} x_1 \cdot p_{X_1|X_2}(x_1 | 2.0) \\ &= \underset{\text{cm}}{4.5 \times 0} + \underset{\text{cm}}{5.0 \times 0.25} + \underset{\text{cm}}{5.5 \times 0} + \underset{\text{cm}}{6.0 \times 0.75} + \\ &\quad \underset{\text{cm}}{6.5 \times 0} + \underset{\text{cm}}{7.0 \times 0} + \underset{\text{cm}}{7.5 \times 0} + \underset{\text{cm}}{8.0 \times 0} \\ &\approx 5.7 \text{ cm} \end{aligned} \quad (34)$$

条件概率的结果还是 cm。同样建议大家手算剩余所有  $E(X_1 | X_2 = x_2)$ 。

此外，请大家也根据全期望定理，利用  $E(X_1 | X_2 = x_2)$  计算  $E(X_1)$ 。并用条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2)$  和条件期望  $E(X_1 | X_2)$  计算花萼长度的方差  $\text{var}(X_1)$ 。

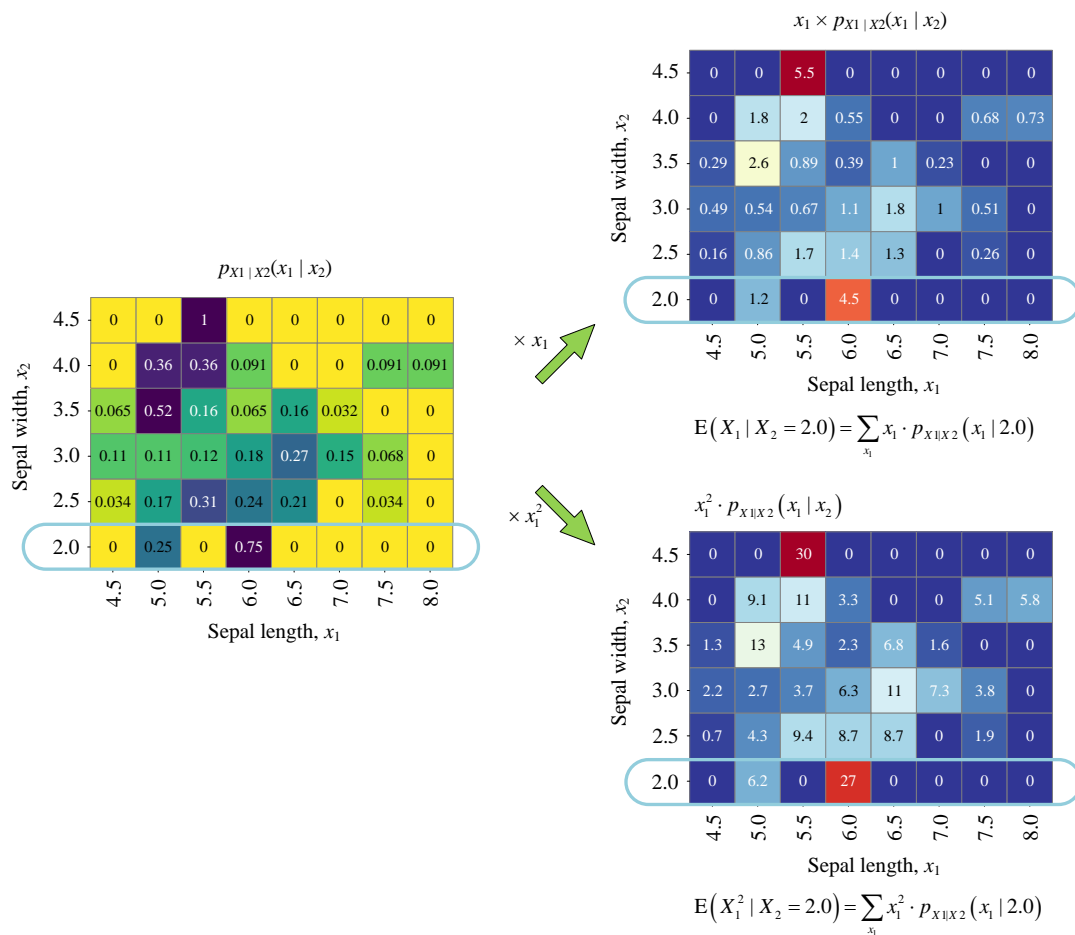
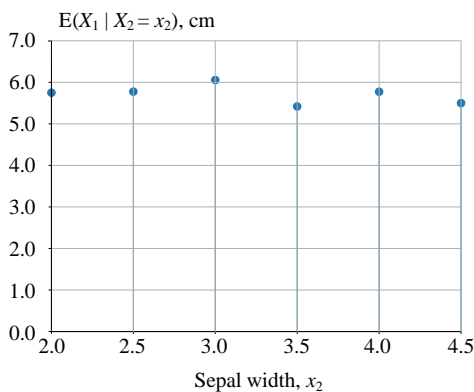


图 15. 给定花萼宽度，花萼长度的条件概率  $p_{X_1|X_2}(x_1 | x_2)$



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

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

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

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

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

图 16. 给定花萼宽度  $X_2$ ，花萼宽度的条件期望  $E(X_1 | X_2 = x_2)$ 

**条件方差**  $\text{var}(X_1 | X_2 = x_2)$

在花萼宽度  $X_2 = 2.0$  为条件下，条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = 2.0)$ ：

$$\begin{aligned}
 \text{var}(X_1 | X_2 = 2.0) &= \sum_{x_1} (x_1 - E(X_1 | X_2 = 2.0))^2 \cdot p_{X_1 | X_2}(x_1 | 2.0) \\
 &= \underbrace{(4.5 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{(5.0 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0.25 + \underbrace{(5.5 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{(6.0 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0.75 + \\
 &\quad \underbrace{(6.5 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{(7.0 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{(7.5 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{(8.0 - 5.75)^2}_{\text{cm}^2} \times 0 \\
 &= 0.1875 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{35}$$

条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = 2.0)$  的单位为  $\text{cm}^2$ 。同样建议大家手算剩余条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = x_2)$ 。

利用条件方差计算技巧，首先计算花萼宽度  $X_2 = 2.0$  为条件下，花萼长度平方的期望：

$$\begin{aligned}
 E(X_1^2 | X_2 = 2.0) &= \sum_{x_1} x_1^2 \cdot p_{X_1 | X_2}(x_1 | 2.0) \\
 &= \underbrace{4.5^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{5.0^2}_{\text{cm}^2} \times 0.25 + \underbrace{5.5^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{6.0^2}_{\text{cm}^2} \times 0.75 + \\
 &\quad \underbrace{6.5^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{7.0^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{7.5^2}_{\text{cm}^2} \times 0 + \underbrace{8.0^2}_{\text{cm}^2} \times 0 \\
 &= 33.25 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{36}$$

图 17 所示为给定花萼长度  $X_2$ ，花萼宽度平方值  $x_1^2$  的条件期望  $E(X_1^2 | X_2 = x_2)$ 。请大家自行代入计算条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = 2.0)$ 。

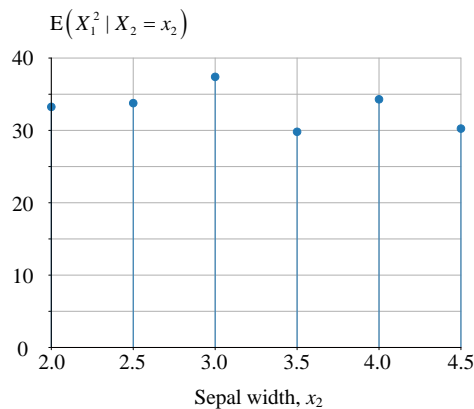
图 17. 给定花萼长度  $X_2$ ，花萼宽度平方值  $X_1^2$  的条件期望  $E(X_1^2 | X_2 = x_2)$

图 18 所示为条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = x_2)$  的火柴梗图。同样，条件期望  $E(X_1 | X_2 = x_2)$ 、条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = x_2)$  都“折叠”了  $x_1$  这个维度，两者仅仅随着  $X_2 = x_2$  取值变化。

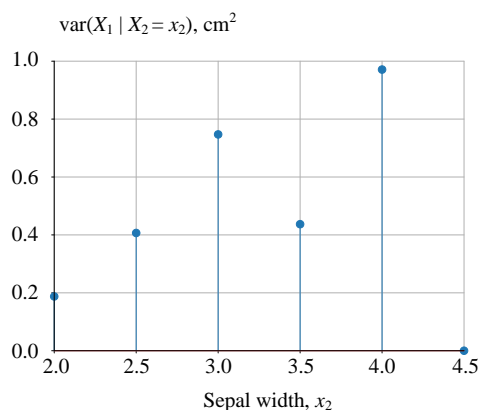


图 18. 给定花萼宽度  $X_2$ ，花萼宽度的条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = x_2)$

类似图 14，我们也绘制给定花萼宽度  $X_2$ ，花萼长度  $X_1$  的条件期望  $E(X_1 | X_2 = x_2) \pm \text{std}(X_1 | X_2 = x_2)$ 。请大家自行分析这幅图像。

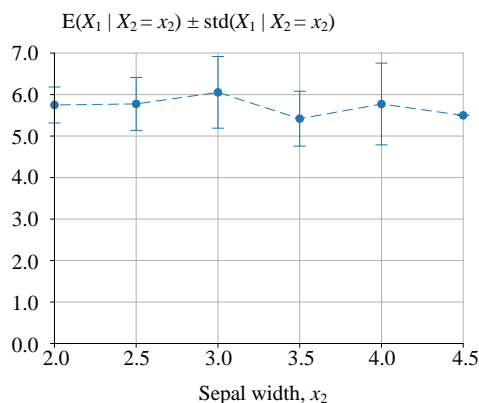


图 19. 给定花萼宽度  $X_2$ ，花萼长度  $X_1$  的条件期望  $E(X_1 | X_2 = x_2) \pm \text{std}(X_1 | X_2 = x_2)$

## 考虑标签：花萼长度

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼长度  $X_1$  的条件期望：

$$\begin{aligned}
 E(X_1 | Y = C_1) &= \sum_{x_1} x_1 \cdot p_{X_1|Y}(x_1 | C_1) \\
 &= \underset{\text{cm}}{4.5} \times 0.22 + \underset{\text{cm}}{5.0} \times 0.56 + \underset{\text{cm}}{5.5} \times 0.2 + \underset{\text{cm}}{6.0} \times 0.02 + \\
 &\quad \underset{\text{cm}}{6.5} \times 0 + \underset{\text{cm}}{7.0} \times 0 + \underset{\text{cm}}{7.5} \times 0 + \underset{\text{cm}}{8.0} \times 0 \\
 &= 5.01 \text{ cm}
 \end{aligned} \tag{37}$$

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼长度  $X_1$  平方期望：

$$\begin{aligned}
 E(X_1^2 | Y = C_1) &= \sum_{x_1} x_1^2 \cdot p_{X_1|Y}(x_1 | C_1) \\
 &= \underset{\text{cm}^2}{4.5^2} \times 0.22 + \underset{\text{cm}^2}{5.0^2} \times 0.56 + \underset{\text{cm}^2}{5.5^2} \times 0.2 + \underset{\text{cm}^2}{6.0^2} \times 0.02 + \\
 &\quad \underset{\text{cm}^2}{6.5^2} \times 0 + \underset{\text{cm}^2}{7.0^2} \times 0 + \underset{\text{cm}^2}{7.5^2} \times 0 + \underset{\text{cm}^2}{8.0^2} \times 0 \\
 &= 25.225 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{38}$$

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼长度  $X_1$  条件方差：

$$\begin{aligned}
 \text{var}(X_1 | Y = C_1) &= E(X_1^2 | Y = C_1) - E(X_1 | Y = C_1)^2 \\
 &= 25.225 - 5.01^2 \\
 &= 0.1249 \text{ cm}^2
 \end{aligned} \tag{39}$$

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼长度  $X_1$  条件标准差：

$$\sigma_{X_1|Y=C_1} = \sqrt{\text{var}(X_1 | Y = C_1)} = \sqrt{0.1249} = 0.353 \text{ cm} \tag{40}$$

请大家自行计算剩余两种情况 ( $Y = C_2, C_3$ )。并利用全期望定理，计算  $E(X_1)$ 。

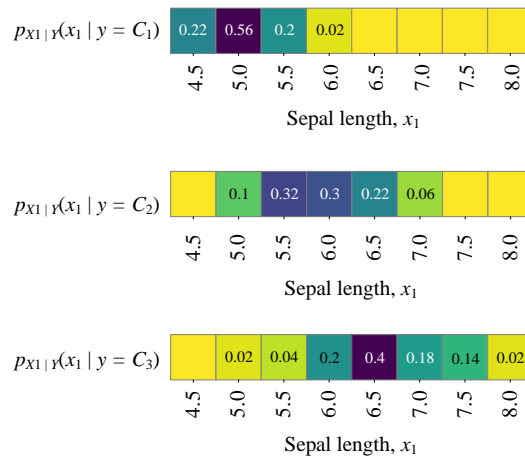


图 20. 给定鸢尾花标签  $Y$ ，花萼长度的条件 PMF

## 考虑标签：花萼宽度

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼宽度  $X_2$  的条件期望：

$$\begin{aligned} E(X_2 | Y = C_1) &= \sum_{x_2} x_2 \cdot p_{X_2|Y}(x_2 | C_1) \\ &= \underset{\text{cm}}{4.5} \times 0.07 + \underset{\text{cm}}{4.0} \times 0.18 + \underset{\text{cm}}{3.5} \times 0.46 + \underset{\text{cm}}{3.0} \times 0.32 + \underset{\text{cm}}{2.5} \times 0.02 + \underset{\text{cm}}{2.0} \times 0 \\ &= 3.43 \text{ cm} \end{aligned} \quad (41)$$

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼宽度  $X_2$  平方期望：

$$\begin{aligned} E(X_2^2 | Y = C_1) &= \sum_{x_2} x_2^2 \cdot p_{X_2|Y}(x_2 | C_1) \\ &= \underset{\text{cm}^2}{4.5^2} \times 0.07 + \underset{\text{cm}^2}{4.0^2} \times 0.18 + \underset{\text{cm}^2}{3.5^2} \times 0.46 + \underset{\text{cm}^2}{3.0^2} \times 0.32 + \underset{\text{cm}^2}{2.5^2} \times 0.02 + \underset{\text{cm}^2}{2.0^2} \times 0 \\ &= 11.925 \text{ cm}^2 \end{aligned} \quad (42)$$

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼宽度  $X_2$  条件方差：

$$\begin{aligned} \text{var}(X_2 | Y = C_1) &= E(X_2^2 | Y = C_1) - E(X_2 | Y = C_1)^2 \\ &= 11.925 - 3.43^2 \\ &= 0.1601 \text{ cm}^2 \end{aligned} \quad (43)$$

给定鸢尾花分类标签  $Y = C_1$ ，花萼宽度  $X_2$  条件标准差：

$$\sigma_{X_2|Y=C_1} = \sqrt{\text{var}(X_2 | Y = C_1)} = \sqrt{0.1601} \approx 0.4 \text{ cm} \quad (44)$$

请大家自行计算鸢尾花其他标签条件下花萼长度、花萼宽度的条件期望、条件方差、条件标准差。

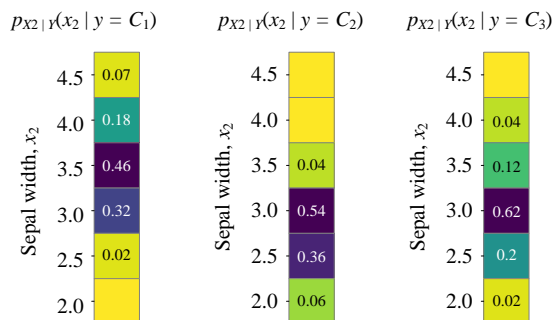


图 21. 给定鸢尾花标签  $Y$ ，花萼宽度的条件 PMF



Bk5\_Ch08\_01.py 代码绘制本节大部分图像。代码中用到了矩阵乘法和广播原则，请大家注意区分。

## 8.4 连续随机变量：条件期望

本节介绍如何计算连续随机变量的条件期望。

### 条件期望 $E(Y|X=x)$

如果  $X$  和  $Y$  均为连续随机变量，如图 22 所示，在给定  $X=x$  条件下，条件期望  $E(Y|X=x)$  定义为：

$$\begin{aligned} E(Y|X=x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot \underbrace{f_{Y|X}(y|x)}_{\text{Conditional}} dy \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot \underbrace{\frac{f_{X,Y}(x,y)}{f_X(x)}}_{\text{Joint} / \text{Marginal}} dy = \frac{1}{\underbrace{f_X(x)}_{\text{Marginal}}} \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot \underbrace{f_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} dy \end{aligned} \quad (45)$$

上式中，边缘概率  $f_X(x)$  可以通过下式得到：

$$f_X(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{X,Y}(x,y) dy \quad (46)$$

(46) 代入 (45) 得到：

$$E(Y|X=x) = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} f_{X,Y}(x,y) dy} \int_{-\infty}^{+\infty} y \cdot f_{X,Y}(x,y) dy \quad (47)$$

上式，相当于消去了  $y$ ，这和本章前文提到的“降维”、“折叠”本质上没有任何区别。对于离散随机变量，折叠用的数学工具为求和符号  $\Sigma$ ；连续随机变量则用积分符号  $\int$ 。

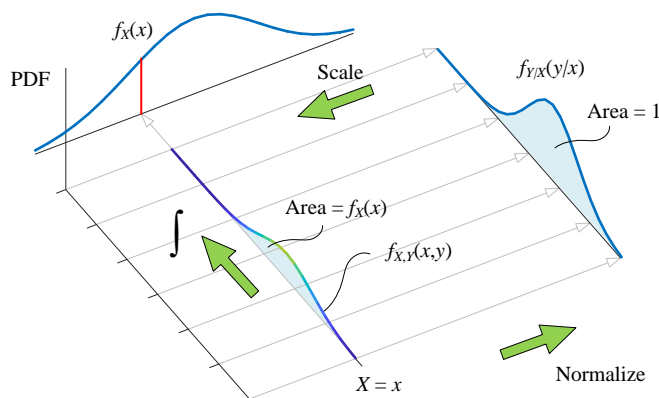


图 22. 联合概率 PDF  $f_{X,Y}(x,y)$  和条件概率 PDF  $f_{Y|X}(y|x)$  的关系， $X$  和  $Y$  均为连续随机变量



**条件期望**  $E(X|Y=y)$ 

同理，如图 23 所示，条件期望  $E(X|Y=y)$  定义为：

$$E(X|Y=y) = \frac{1}{\int_{-\infty}^{+\infty} f_{X,Y}(x,y) dx} \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f_{X,Y}(x,y) dx \quad (48)$$

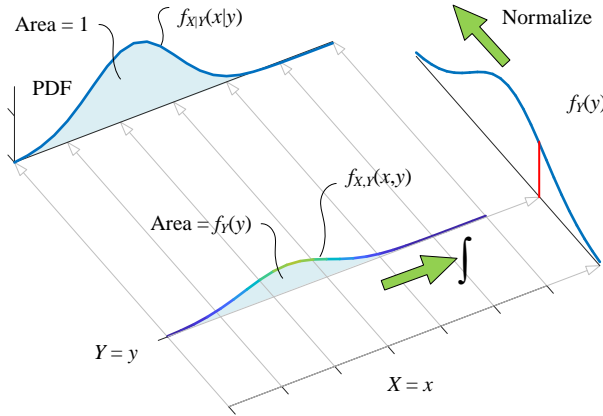


图 23. 联合概率 PDF  $f_{X,Y}(x,y)$  和条件概率 PDF  $f_{X|Y}(x|y)$  的关系， $X$  和  $Y$  均为连续随机变量

## 8.5 连续随机变量：条件方差

本节介绍如何求连续随机变量的条件方差。

**条件方差**  $\text{var}(Y|X=x)$ 

在给定  $X=x$  条件下，条件方差  $\text{var}(Y|X=x)$  (conditional variance of  $Y$  given  $X=x$ ) 定义为：

$$\begin{aligned} \text{var}(Y|X=x) &= E\left\{\left(Y - E(Y|X=x)\right)^2 | x\right\} \\ &= \int_y \left(y - E(Y|X=x)\right)^2 \cdot f_{Y|X}(y|x) dy \end{aligned} \quad (49)$$

对于连续随机变量，求条件方差也可以用 (14) 这个技巧。

**条件方差**  $\text{var}(X|Y=y)$ 

条件方差  $\text{var}(X|Y=y)$  定义为：

$$\begin{aligned}\text{var}(X|Y=y) &= E\left\{\left(X - E(X|Y=y)\right)^2 | y\right\} \\ &= \int_x \left(X - E(X|Y=y)\right)^2 \cdot f_{X|Y}(x|y) dx\end{aligned}\quad (50)$$

有了以上理论基础，本书第 12 章将以二元高斯分布为例，继续深入讲解条件期望和条件方差。

## 8.6 连续随机变量：以鸢尾花为例

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

图 24 (a) 所示为条件概率 PDF  $f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)$  随花萼长度、花萼宽度变化曲面。本书前文提过  $f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)$  也是一个二元函数。这个二元函数的重要特点有两个：

$$\begin{aligned}f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1) &\geq 0 \\ \int_{x_2} f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1) dx_2 &= 1\end{aligned}\quad (51)$$

正如图 24 (a) 所示，阴影区域的面积为 1。

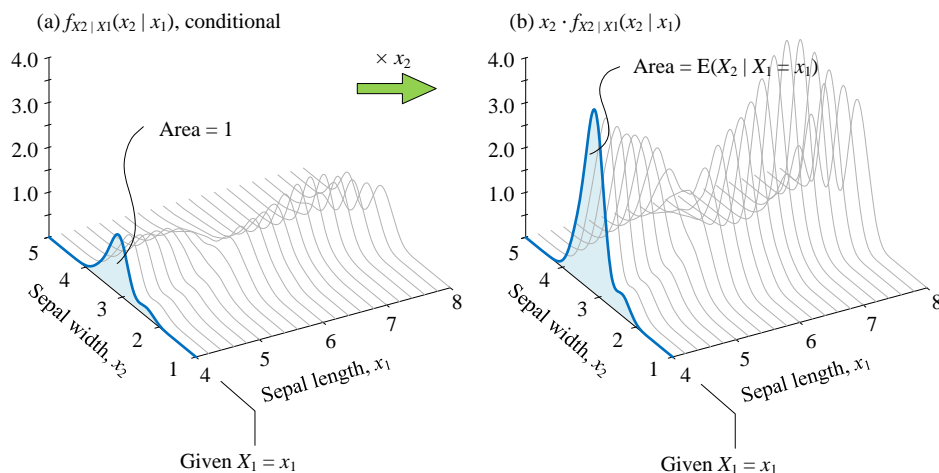


图 24.  $f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)$  条件概率密度三维等高线和平面等高线，不考虑分类

根据 (47)，为了计算条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ ，我们需要计算  $x_2 \cdot f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)$  和  $x_2$  围成图像的面积，即图 24 (b) 阴影部分面积：

$$E(X_2 | X_1 = x_1) = \int_{x_2} x_2 \cdot \underbrace{f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)}_{\text{Conditional}} dx_2 \quad (52)$$

然后，我们可以计算鸢尾花宽度平方的条件期望  $E(X_2^2 | X_1 = x_1)$ ：

$$E(X_2^2 | X_1 = x_1) = \int_{x_2} x_2^2 \cdot \underbrace{f_{X_2|X_1}(x_2 | x_1)}_{\text{Conditional}} dx_2 \quad (53)$$

然后，可以利用技巧求得条件方差  $\text{var}(X_2 | X_1 = x_1)$ ：

$$\text{var}(X_2 | X_1 = x_1) = E(X_2^2 | X_1 = x_1) - E(X_2 | X_1 = x_1)^2 \quad (54)$$

上式开平方得到，条件均方差  $\text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$ 。

我们知道条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ 、条件均方差  $\text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$  都随着  $X_1 = x_1$  取值变化，而且它们两个单位都是 cm。图 25 把条件期望、条件均方差整合到一幅图上。

条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$  实际上就是“回归”，给定输入条件  $X_1 = x_1$ ，求  $X_2$  的输出值。图 25 中黑色实线相当于“回归曲线”。

图 25 还有两条带宽 (bandwidth)，它们分别代表  $\mu_{X_2|X_1=x_1} \pm \sigma_{X_2|X_1=x_1}$ 、 $\mu_{X_2|X_1=x_1} \pm 2\sigma_{X_2|X_1=x_1}$ 。带宽随着  $X_1 = x_1$  移动，条件均方差越大，带宽就越宽。

比较图 25、图 26，给定  $X_1 = x_1$  条件下， $X_2$  上散点越集中，条件均方差  $\text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$  越小，比如  $X_1 = 7$  cm；相反， $X_2$  上散点越分散，条件均方差  $\text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$  越大，比如  $X_1 = 5.5$  cm。

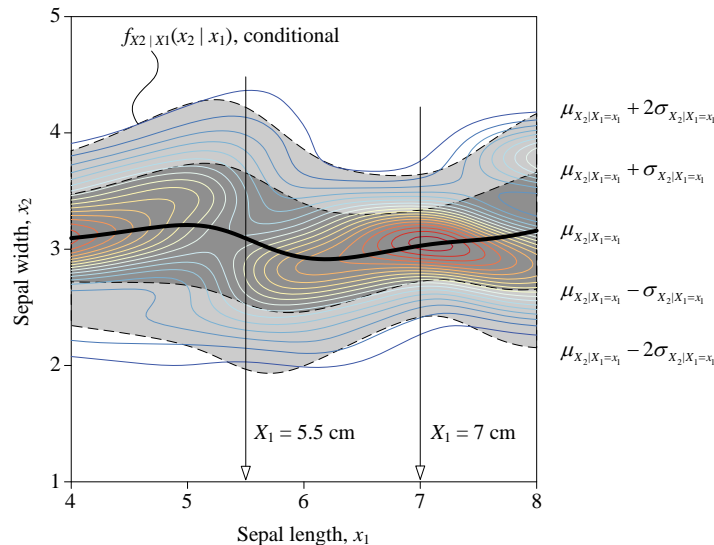


图 25. 条件期望  $E(X_2 | X_1 = x_1)$ 、条件均方差  $\text{std}(X_2 | X_1 = x_1)$  之间的关系

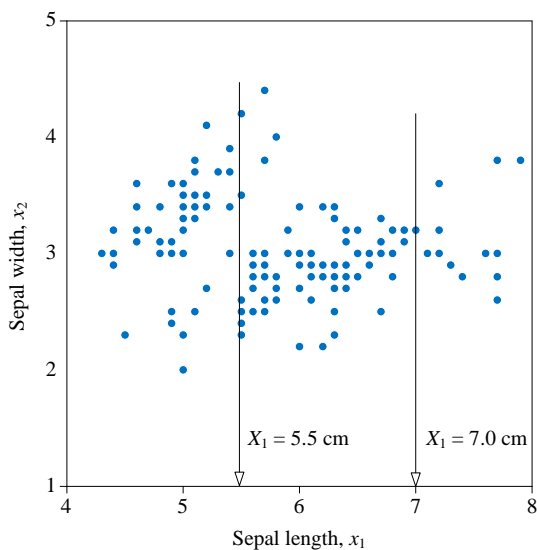


图 26. 鸢尾花数据花萼长度、花萼宽度散点图，不考虑分类

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

为了计算条件期望  $E(X_1 | X_2 = x_2)$ ，我们需要计算  $x_1 \cdot f_{X_1|X_2}(x_1 | x_2)$  和  $x_1$  围成图像的面积，即图 27 (b) 阴影部分面积：

$$E(X_1 | X_2 = x_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{x_1 \cdot f_{X_1|X_2}(x_1 | x_2)}_{\text{Conditional}} dx_1 \quad (55)$$

然后，我们可以计算鸢尾长度平方的条件期望  $E(X_1^2 | X_2 = x_2)$ ：

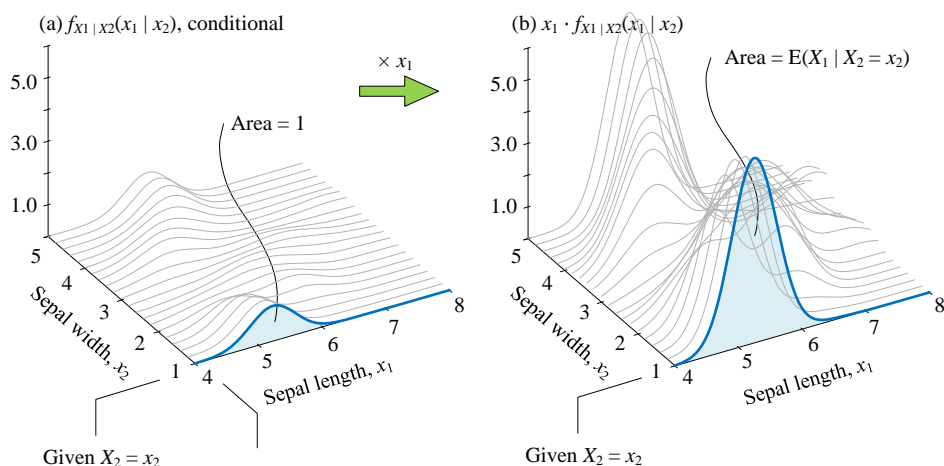
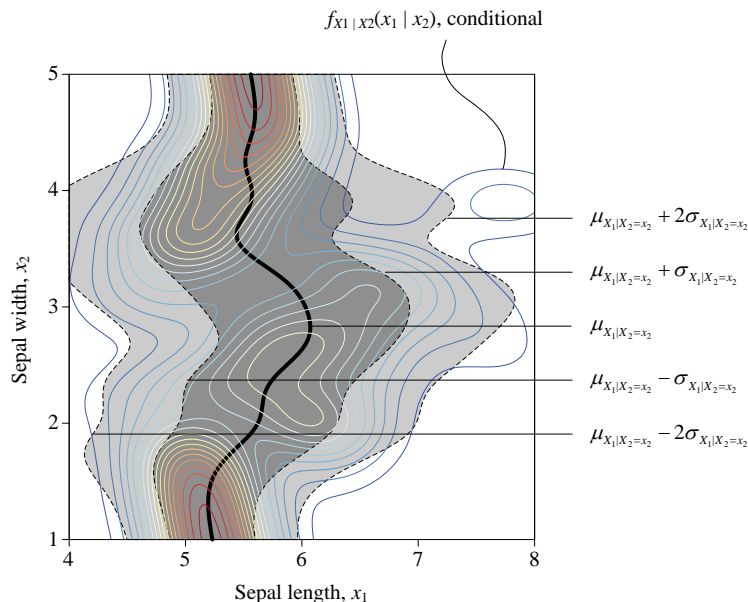
$$E(X_1^2 | X_2 = x_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{x_1^2 \cdot f_{X_1|X_2}(x_1 | x_2)}_{\text{Conditional}} dx_1 \quad (56)$$

然后，可以利用技巧求得条件方差  $\text{var}(X_1 | X_2 = x_2)$ ：

$$\text{var}(X_1 | X_2 = x_2) = E(X_1^2 | X_2 = x_2) - E(X_1 | X_2 = x_2)^2 \quad (57)$$

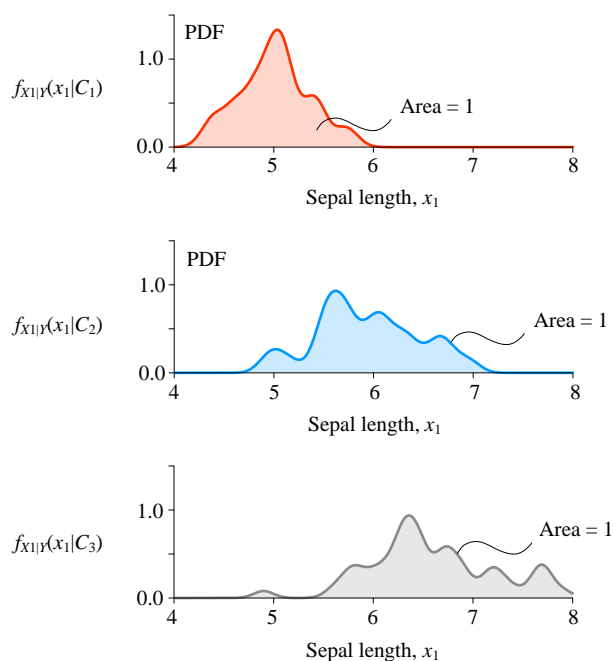
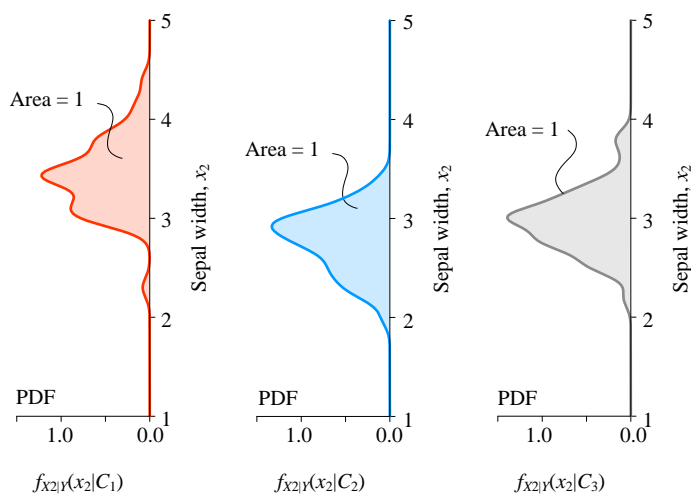
上式开平方得到条件均方差  $\text{std}(X_1 | X_2 = x_2)$ 。

我们知道条件期望  $E(X_1 | X_2 = x_2)$ 、条件标准差  $\text{std}(X_1 | X_2 = x_2)$  都随着  $X_2 = x_2$  取值变化，而且它们两个单位都是 cm。我们想办法把它们画在一幅图上，具体如图 28 所示。请大家自己从“回归”角度自行分析图 28。

图 27.  $f_{X1|X2}(x1|x2)$  条件概率密度三维等高线和平面等高线图 28. 条件期望  $E(X1 | X2 = x2)$ 、条件标准差  $std(X1 | X2 = x2)$  之间的关系

## 以鸢尾花为例，考虑标签

同理，我们可以计算给定标签条件下，鸢尾花花萼长度（图 29）、花萼宽度（图 30）的条件期望、条件方差等。请大家自己完成这几个数值计算。

图 29. 给定鸢尾花标签  $Y$ ，花萼长度的条件概率密度，连续随机变量图 30. 给定鸢尾花标签  $Y$ ，花萼宽度的条件概率密度，连续随机变量

## 8.7 再谈如何分割 1

本书前文介绍过，概率分布无非就是各种方式将样本空间概率值 1 进行“切片、切块”、“切丝、切条”。本节从这个视角总结本书这个话题讲解的主要内容。

## 一元

一元随机变量在一个维度上切割“1”。如果随机变量  $X$  离散，如图 31 (a) 所示，概率值 1 被分割成若干份，每一份还是“概率”。也就是说一元离散随机变量概率质量函数 PMF  $p_X(x)$  对应概率值。 $p_X(x)$  对应的数学运算是  $\Sigma$ 。图 31 (a) 中所有概率值之和为 1：

$$\sum_x p_X(x) = 1 \quad (58)$$

如果随机变量  $X$  连续，如图 31 (b) 所示， $X$  则对应概率密度函数 PDF  $f_X(x)$ 。 $f_X(x)$  积分结果才是概率值，因此  $f_X(x)$  对应的数学运算符为  $\int$ 。

$f_X(x)$  和横轴围成的面积为 1，对应样本空间概率值“1”：

$$\int_x f_X(x) = 1 \quad (59)$$

图 31 (b) 中连续随机变量  $X$  的取值范围是实数轴的一个区间。图 31 (c) 中连续随机变量  $X$  的取值范围是整个实数轴。图 31 (c) 中， $f_X(x)$  和整个横轴围成的面积为 1。

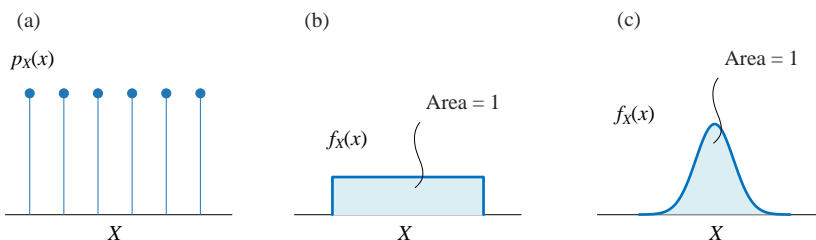


图 31. 一元随机变量

## 二元

二元随机变量  $(X_1, X_2)$  在两个维度上对样本空间进行分割。

如图 32 (a) 所示，如果  $X_1$  和  $X_2$  都是离散随机变量，概率质量函数  $p_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$  本身还是概率值。 $p_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$  二重求和的结果为 1：

$$\sum_{x_1} \sum_{x_2} p_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = 1 \quad (60)$$

大家试图调换求和顺序时，要格外小心。并不是所有的多重求和都可以任意调换求和先后顺序。

而  $p_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$  偏求和便得到边缘概率质量函数  $p_{X_1}(x_1)$ 、 $p_{X_2}(x_2)$ ：

$$\begin{aligned} \sum_{x_2} p_{X_1, X_2}(x_1, x_2) &= p_{X_1}(x_1) \\ \sum_{x_1} p_{X_1, X_2}(x_1, x_2) &= p_{X_2}(x_2) \end{aligned} \quad (61)$$

如图 33 所示，二元随机变量偏求和将某个变量“消去”，这相当于折叠。

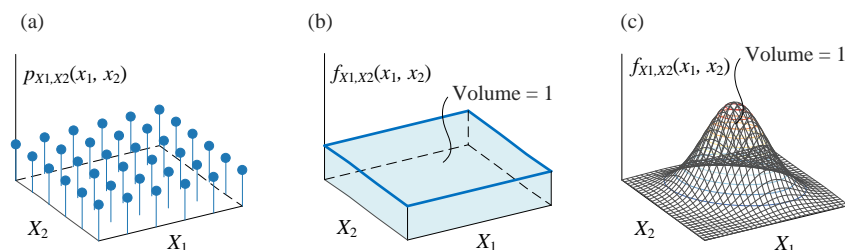


图 32. 二元随机变量

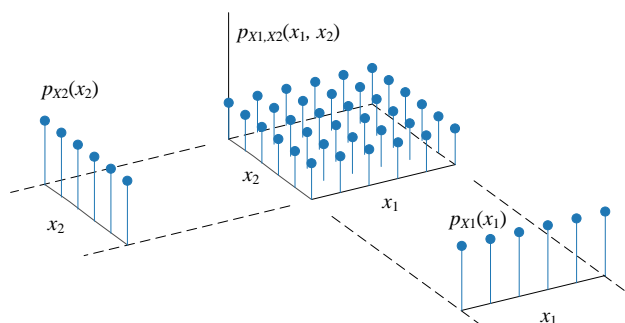


图 33. 二元随机变量偏求和，折叠某一变量

如图 32 (b) 所示，如果  $X_1$  和  $X_2$  都是连续随机变量，概率密度函数  $f_{X1,X2}(x_1, x_2)$  如下二重积分的结果为 1：

$$\iint_{x_2, x_1} f_{X1,X2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = 1 \quad (62)$$

这相当于图 32 (b) 中几何体和水平面围成的几何图形的体积为 1。如图 32 (c) 所示， $X_1$  和  $X_2$  的取值范围也可以是整个水平面，即  $\mathbb{R}^2$ 。

$f_{X1,X2}(x_1, x_2)$  偏积分边缘概率密度函数  $f_{X1}(x_1)$ 、 $f_{X2}(x_2)$ ：

$$\begin{aligned} \int_{x_2} f_{X1,X2}(x_1, x_2) dx_2 &= f_{X1}(x_1) \\ \int_{x_1} f_{X1,X2}(x_1, x_2) dx_1 &= f_{X2}(x_2) \end{aligned} \quad (63)$$

### 三元

图 34 (a) 中  $(X_1, X_2, X_3)$  三个随机变量都是离散随机变量，每个点  $(x_1, x_2, x_3)$  处都有一个概率值，这些概率值可以写成概率质量函数  $p_{X1,X2,X3}(x_1, x_2, x_3)$  这种形式。



请大家自己写出如何根据  $p_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, x_3)$  计算  $p_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$ 、 $p_{X_1}(x_1)$ 。

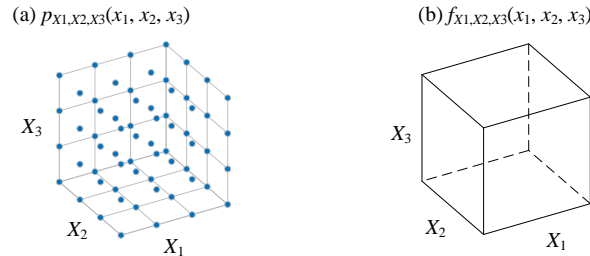


图 34. 三元随机变量

图 34 (b) 中  $(X_1, X_2, X_3)$  三个随机变量都是连续随机变量，整个  $\mathbb{R}^3$  空间中的每一点  $(x_1, x_2, x_3)$  处都有一个概率密度值  $f_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, x_3)$ 。这就是本书前文提到的“体密度”。也请大家自己写出如何根据  $f_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, x_3)$  计算  $f_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$ 、 $f_{X_1}(x_1)$ 。

图 35 所示为在  $X_3$  取不同值时  $X_3 = c$ ，概率密度值  $f_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, c)$  “切片”。强调一下，图 35 中  $X_3$  还是连续随机变量。

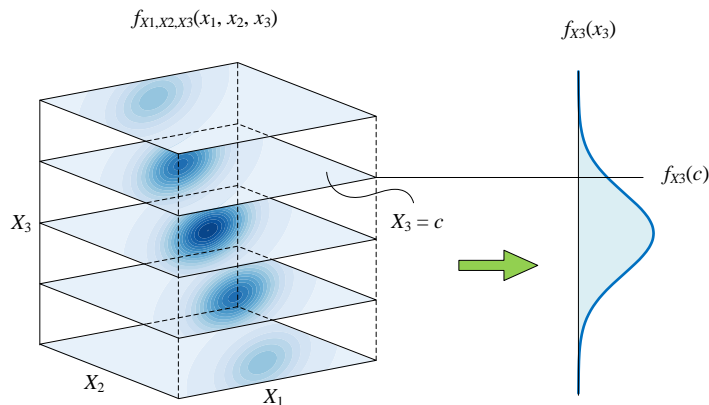


图 35. 三个随机变量都是连续随机变量

$f_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, c)$  这个“切片”对  $x_1$  和  $x_2$  二重积分得到的是边缘概率密度  $f_{X_3}(c)$ ：

$$\iint_{x_2, x_1} f_{X_1, X_2, X_3}(x_1, x_2, c) dx_1 dx_2 = f_{X_3}(c) \quad (64)$$

上式相当于，我们不再关心图 35 中这些切片的具体等高线，而是将其归纳为一个数值。

## 混合

此外，多元随机变量还可以是离散和随机变量的混合形式。一个最简单的例子就是鸢尾花数据。如图 36 所示，分类标签将鸢尾花数据分成了三层，对应  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$  三个标签。图 36 左侧的数据构成了样本空间  $\Omega$ 。显然  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $C_3$  互不相容，形成对样本空间  $\Omega$  的分割。

➡ 这体现的就是本书第 3 章讲过的全概率定理。

花萼长度  $X_1$ 、花萼宽度  $X_2$  都是连续随机变量，但是标签  $Y$  为离散随机变量。

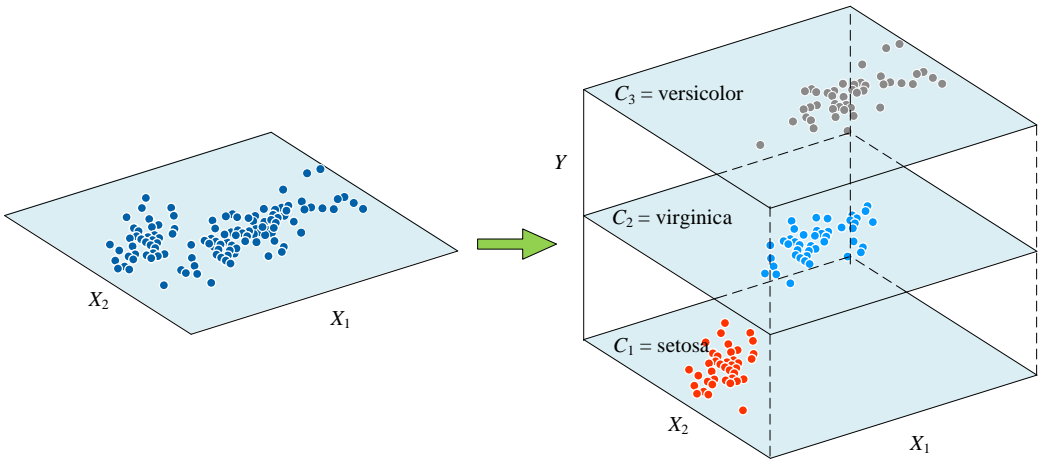


图 36. 分类标签将鸢尾花数据分层

如图 37 所示，每一类不同标签的样本数据都有其联合概率密度分布  $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_1)$ 、 $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_2)$ 、 $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_3)$ 。

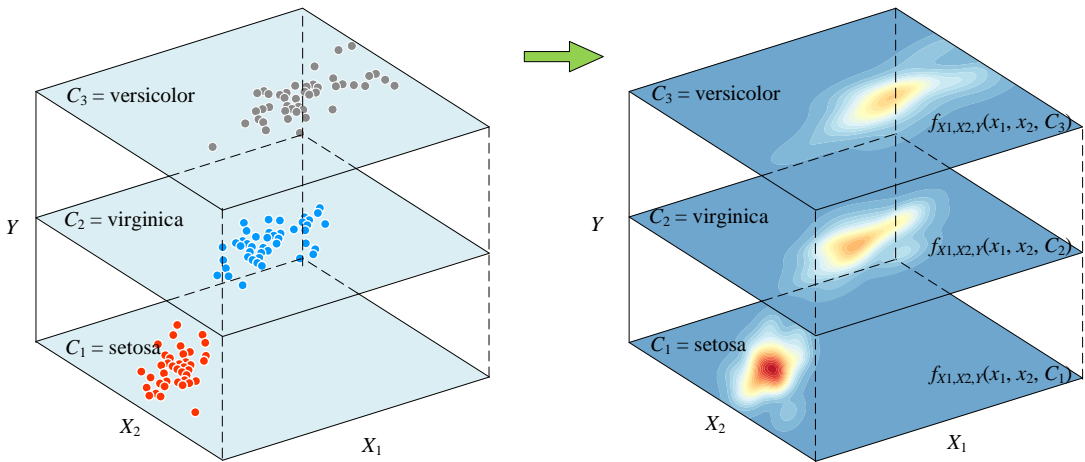


图 37. 鸢尾花数据，花萼长度  $X_1$ 、花萼宽度  $X_2$ 、标签  $Y$

图 38 所示为两个不同方向压扁  $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, y)$ 。

$f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_1)$ 、 $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_2)$ 、 $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_3)$  这三个平面分别二重积分得到  $Y$  的边缘概率：

$$\begin{aligned}\iint_{x_2, x_1} f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_1) dx_1 dx_2 &= p_Y(C_1) \\ \iint_{x_2, x_1} f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_2) dx_1 dx_2 &= p_Y(C_2) \\ \iint_{x_2, x_1} f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_3) dx_1 dx_2 &= p_Y(C_3)\end{aligned}\quad (65)$$

显然， $p_Y(C_1)$ 、 $p_Y(C_2)$ 、 $p_Y(C_3)$ 之和为 1。

沿着  $Y$  方向将  $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, y)$  压扁得到  $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2)$ ：

$$f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) = f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_1) + f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_2) + f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_3) \quad (66)$$

而  $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2)$  和水平面构成的几何形体的体积为 1，即：

$$\iint_{x_2, x_1} f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = 1 \quad (67)$$

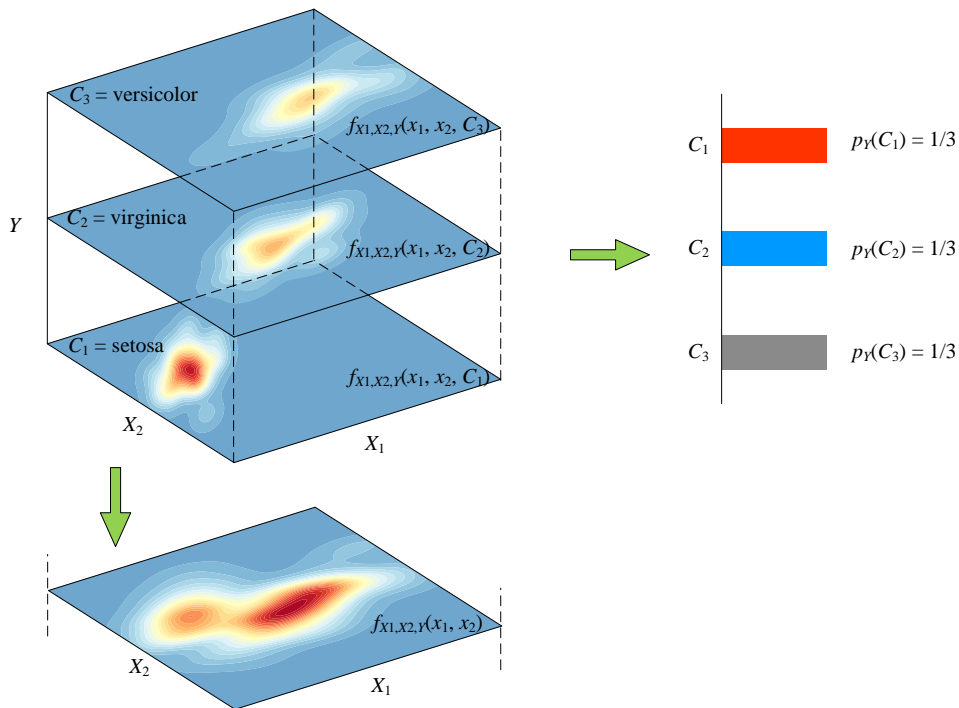


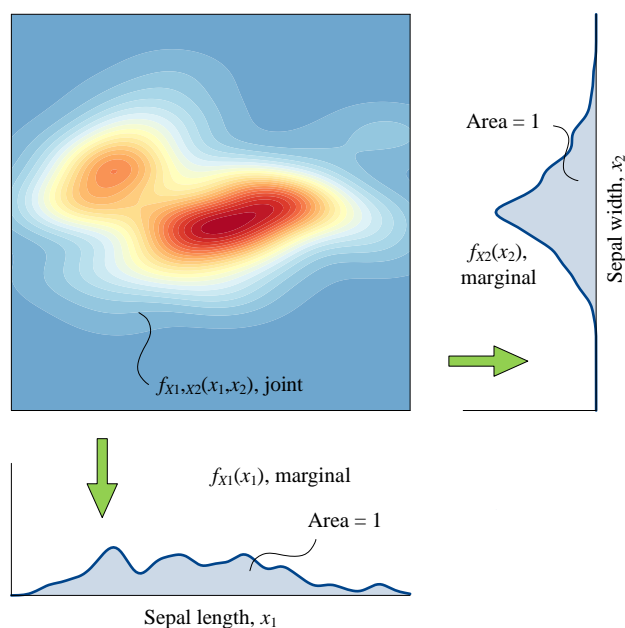
图 38. 两个不同方向压扁  $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, y)$

此外， $f_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$  可以沿着不同方向进一步“压扁”得到边缘概率  $f_{X_1}(x_1)$ 、 $f_{X_2}(x_2)$ ：

$$\begin{aligned}\int_{x_2} f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_2 &= f_{X_1}(x_1) \\ \int_{x_1} f_{X_1, X_2}(x_1, x_2) dx_1 &= f_{X_2}(x_2)\end{aligned}\quad (68)$$

$f_{X_1}(x_1)$ 、 $f_{X_2}(x_2)$  和  $x_1$ 、 $x_2$  轴围成的面积也都是 1：

$$\begin{aligned}\int_{x_1} f_{X_1}(x_1) dx_1 &= 1 \\ \int_{x_2} f_{X_2}(x_2) dx_2 &= 1\end{aligned}\quad (69)$$



总结来说，以上几种情况无非就是对 1 的“切片、切块”、“切丝、切条”。

此时，希望大家闭上眼睛想  $f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_1)$ 、 $f_{X_1, X_2}(x_1, x_2)$  的时候看到的是等高线；想  $f_{X_1}(x_1)$  看到曲线，想  $p_Y(C_1)$  的时候看到一个数值 (1/3)。

## 不同的混合形式

图 39 所示为二元随机变量的不同离散、连续混合形式。图 39 (a) 两个随机变量都是连续。图 39 (b) 中  $X_1$  为离散随机变量， $X_2$  为连续随机变量；图 39 (c) 反之。图 39 (d) 中，两个随机变量都是离散随机变量。图 40 所示为三元随机变量的不同离散、连续混合形式，请大家自己分析其中子图。这实际上回答了本书第 4 章提出的问题。



在本书贝叶斯统计推断 (第 20 ~ 22 章) 中, 大家会发现我们不再区分 PDF、PMF, 概率分布函数全部统一为  $f()$ 。

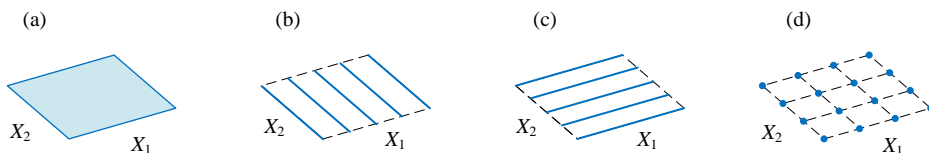


图 39. 二元随机变量, 混合

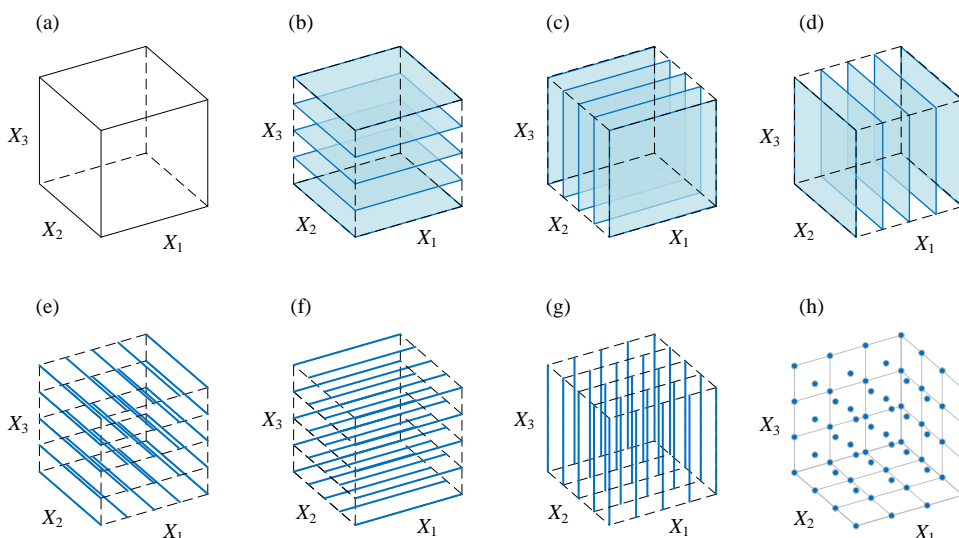


图 40. 三元随机变量, 混合

## 条件概率：重新定义 1

条件概率其实很好理解, 条件概率的“条件”就是划定“新的样本空间”, 对应概率值也是 1。也就是说, 把从原始样本空间中切出来的“一片、一块、一丝、一条”作为新的样本空间。

如图 41 所示, 给定标签为  $Y = C_2$  条件下, 利用贝叶斯定理, 条件概率可以通过下式求得:

$$f_{X_1, X_2|Y}(x_1, x_2 | C_2) = \frac{f_{X_1, X_2, Y}(x_1, x_2, C_2)}{p_Y(C_2)} \quad (70)$$

分母中的  $p_Y(C_2)$  起到归一化的作用。  $Y = C_2$  就是原始样本空间中切出来的“一片”。

也就是说,  $f_{X_1, X_2|Y}(x_1, x_2 | C_2)$  二重积分的结果为 1:

$$\int_{x_2} \int_{x_1} f_{X_1, X_2|Y}(x_1, x_2 | C_2) dx_1 dx_2 = 1 \quad (71)$$

上式中这个“1”对应条件概率  $f_{X_1, X_2|Y}(x_1, x_2 | C_2)$  的条件—— $Y = C_2$ 。 $Y = C_2$  就是这个条件概率的“新样本空间”。

- ➔ 本书第 6 章还介绍过，以鸢尾花花萼长度或宽度为条件的条件概率，请大家回顾。
- ➔ 鸢尾花书《可视之美》介绍如何绘制本节分层等高线。

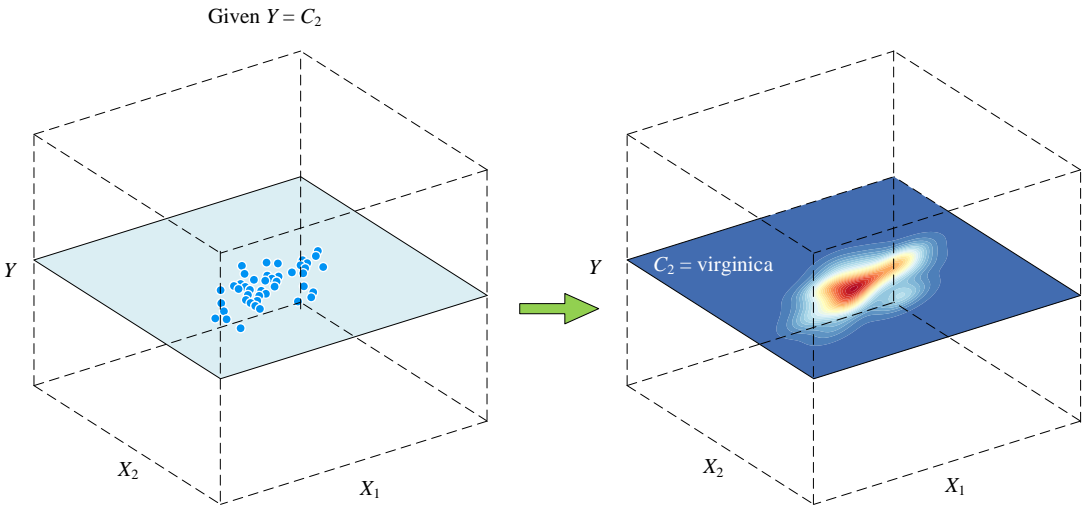
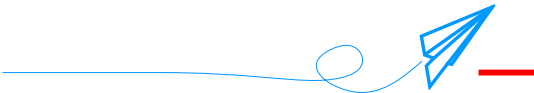


图 41. 条件概率，给定标签为  $Y = C_2$



条件期望是指在已知一些条件下，一个随机变量的期望值。同理，条件方差是指在给定某些条件下，随机变量的方差。它俩表示给定某些信息或事件之后，对随机变量的期望、方差的预测或估计。其实生活中条件期望、方差无处不在，大家多多留意。条件期望、方差在概率论、统计学和经济学等领域有广泛的应用，例如在回归分析、决策树、贝叶斯推断等中。

至此，本书“概率”板块介绍。下一板块将用五章深入介绍高斯分布，一元、二元、多元、条件高斯分布，以及协方差矩阵。