# Vector and More 1 不止向量

一个有关向量的故事,从鸢尾花数据讲起



科学的每一次巨大进步, 都源于颠覆性的大胆想象。

Every great advance in science has issued from a new audacity of imagination.

—— 约翰·杜威 (John Dewey) | 美国著名哲学家、教育家、心理学家 | 1859 ~ 1952



- ◀ sklearn.datasets.load iris() 加载鸢尾花数据
- ✓ seaborn.heatmap() 绘制热图



## 1. 有数据的地方,就有矩阵

本章主角虽然是**向量** (vector),但是这个有关向量的故事先从**矩阵** (matrix) 讲起。

简单来说,矩阵是由若干行或若干列元素排列得到的数组 (array)。矩阵内的元素可以是实数、虚数、符号,甚至是代数式。

从数据角度来看,矩阵就是表格!

#### 鸢尾花数据集

数据科学、机器学习算法和模型都是"数据驱动"。没有数据,任何的算法都玩不转,数据是各种算法的绝对核心。优质数据本身就极具价值,甚至不需要借助任何模型;反之,垃圾进,垃圾出 (Garbage in, garbage out, GIGO)。

本书使用频率最高的数据是鸢尾花卉数据集。数据集的全称为**安德森鸢尾花卉数据集** (Anderson's Iris data set),是植物学家**埃德加·安德森** (Edgar Anderson) 在加拿大魁北克加斯帕半岛上的采集的鸢尾花样本数据。图 1 所示为鸢尾花数据集部分数据。

Index	Sepal length	Sepal width	Petal length	Petal width	Species
maex	$X_1$	$X_2$	$X_3$	$X_4$	C
1	5.1	3.5	1.4	0.2	
2	4.9	3	1.4	0.2	/
3	4.7	3.2	1.3	0.2	Setosa
				•••	$C_1$
49	5.3	3.7	1.5	0.2	CI
50	5	3.3	1.4	0.2	
51	7	3.2	4.7	1.4	
52	6.4	3.2	4.5	1.5	
53	6.9	3.1	4.9	1.5	Versicolor
	•••			•••	
99	5.1	2.5	3	1.1	$C_2$
100	5.7	2.8	4.1	1.3	
101	6.3	3.3	6	2.5	
102	5.8	2.7	5.1	1.9	
103	7.1	3	5.9	2.1	Virginica
					$C_3$
149	6.2	3.4	5.4	2.3	<u> </u>
150	5.9	3	5.1	1.8	

图 1. 鸢尾花数据,数值数据单位为厘米 (cm)

图 1 给出的这些样本都归类于鸢尾属下的三个亚属,分别是**山鸢尾** (setosa)、**变色鸢尾** (versicolor) 和**维吉尼亚鸢尾** (virginica)。每一类鸢尾花收集了 50 条样本记录,共计 150 条。

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

鸢尾花四个特征被用作样本的定量分析,它们分别是**花萼长度** (sepal length)、**花萼宽度** (sepal width)、**花瓣长度** (petal length) 和**花瓣宽度** (petal width)。

 $lacktrule \Delta$  注意,本书用大写、粗体、斜体字母代表矩阵,比如 X、A、 $\Sigma$ 、 $\Lambda$ 。特别地,本书用 X代表样本数据矩阵,用  $\Sigma$ 代表方差协方差矩阵 (variance covariance matrix)。本书用小写、粗体、斜体字母代表向量,比如 x、 $x_1$ 、 $x^{(1)}$ 、v。

如图 2 所示,本书常用<mark>热图</mark> (heatmap) 可视化矩阵。不考虑鸢尾花分类标签,鸢尾花数据矩阵 X有 150 行、4 列,因此 X 也常记做  $X_{150 \times 4}$ 。

#### 行向量、列向量

前文提到,矩阵可以视作由一系列行向量、列向量构造而成。

反向来看,矩阵切丝、切片可以得到行向量、列向量。如图 2 所示,X 任一行向量 ( $x^{(1)}$ 、 $x^{(2)}$ 、…、 $x^{(150)}$ ) 代表一朵鸢尾花样本花萼长度、花萼宽度、花瓣长度和花瓣宽度测量结果。而X某一列向量 ( $x_1$ 、 $x_2$ 、 $x_3$ 、 $x_4$ ) 为鸢尾花某个特征的样本数据。

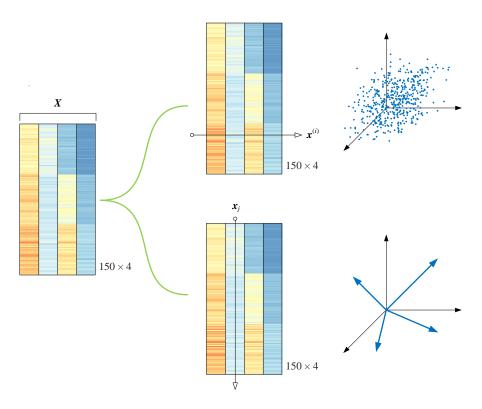


图 2. 矩阵可以分割成一系列行向量或列向量

#### 图片

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

数据矩阵其实无处不在。

再举个例子,大家日常随手拍摄的照片实际上就是数据矩阵。图 3 为作者拍摄的一张鸢尾花照片。把这张照片做黑白处理后,它变成了形状为 2990 × 2714 的矩阵,即 2990 行、2714 列。

图 3 这张照片显然不是矢量图。不断放大,我们会发现照片的局部变得越来越模糊。继续放大,我们发现这张照片竟然是由一系列灰度热图构成。再进一步,提取其中图片的 4 个像素点,也就是矩阵的 4 个元素,我们得到一个 2×2 实数矩阵。

对于大部分机器学习应用,比如识别人脸、判断障碍物等,不需要输入彩色照片,黑白照片 的数据矩阵含有的信息就足够用。

本系列丛书《数据科学》将采用主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 继续深入分析图 3 这幅鸢尾花黑白照片。

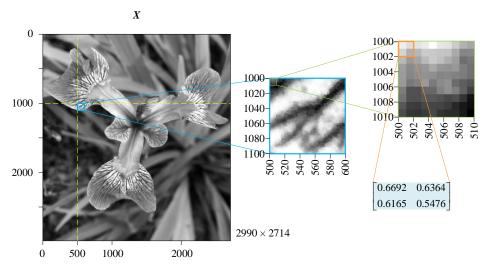


图 3. 照片也是数据矩阵

## 1.2 有矩阵的地方,就有向量

#### 行向量

首先,矩阵 X 可以看做是由一系列**行向**量 (row vector) 上下叠加而成。

如图 4 所示,矩阵 X 的第 i 行可以写成行向量  $x^{(i)}$ 。上标圆括号中的 i 代表序号,对于鸢尾花数据集, $i=1\sim150$ 。

举个例子,X的第 1 行行向量记做  $x^{(1)}$ ,具体为:

$$\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 5.1 & 3.5 & 1.4 & 0.2 \end{bmatrix}_{1 \times 4}$$
 (1)

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

行向量 $x^{(1)}$ 代表鸢尾花数据集编号为 1 的样本。行向量 $x^{(1)}$ 的四个元素依次代表花萼长度 (sepal length)、花萼宽度 (sepal width)、花瓣长度 (petal length) 和花瓣宽度 (petal width)。长、宽单 位均为厘米cm。

行向量 $\mathbf{x}^{(1)}$ 也可以视作 1 行、4 列的矩阵,即形状为  $1 \times 4$ 。

虽然 Python 是基于 0 编号 (zero-based indexing),本书对矩阵行、列编号时,还是延续线性代 数传统,采用基于1编号 (one-based indexing)。

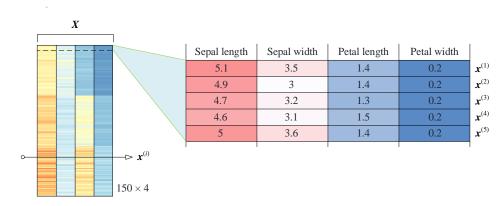


图 4. 鸢尾花数据,行向量代表样本数据点

#### 列向量

矩阵 X 也可以视作一系列列向量 (column vector) 左右排列而成。

如图2所示,矩阵X的第j列可以写成列向量 $x_j$ 。下标j代表列序号,对于鸢尾花数据集,不 考虑分类标签的话,  $j=1\sim4$ 。

比如, X的第 1 列向量记做  $x_1$ , 具体为:

$$\mathbf{x}_{1} = \begin{bmatrix} 5.1 \\ 4.9 \\ \vdots \\ 5.9 \end{bmatrix}_{150 \times 1}$$
 (2)

列向量 $x_1$ 代表鸢尾花 150 个样本数据花萼长度数值。列向量 $x_1$  可以视作 150 行、1 列的矩 阵,即形状为  $150 \times 1$ 。整个数据矩阵 X 可以写成四个列向量,即  $X = [x_1, x_2, x_3, x_4]$ 。

▲ 再次强调,为了区分数据矩阵中的行向量和列向量,在编号时,本书中行向量采用上标加 圆括号,比如 $x^{(1)}$ 。而列向量编号采用下标,比如 $x_1$ 。

有什么办法可视化这四个列向量?怎么量化它们之间的关系?答案会在本书第12章揭晓。

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

此外,大家熟悉的三原色光模式 (RGB color mode) 中每种颜色实际上也可以写成列向量,如 所示图 5 的 7 个颜色。在本书第 7 章中,我们将用 RGB 解释向量空间等概念。

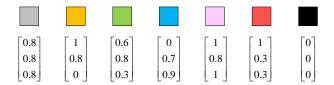


图 5.7个颜色对应的 RGB 颜色向量

不要被向量、矩阵这些名词吓到。矩阵就是一个表格,而这个表格可以划分成若干行、若干列,它们分别叫行向量、列向量。

## 1.3 有向量的地方,就有几何

#### 数据云、投影

取出鸢尾花前两个特征——花萼长度、花萼宽度——对应的数据。把它们以坐标的形式画在平面直角坐标系 (记做  $\mathbb{R}^2$ ) 中,我们便得到平面散点图。如图 6 所示,这幅散点图好比样本"数据云"。

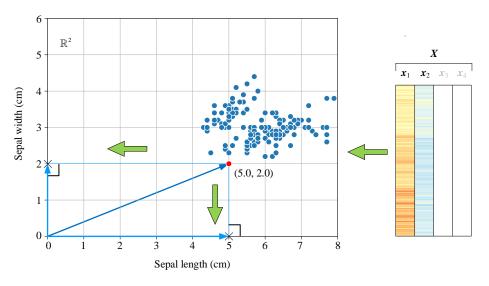


图 6. 鸢尾花前两个特征数据散点图

图 6 中数据点 (5.0, 2.0) 可以写成行向量 [5.0, 2.0]。(5.0, 2.0) 是序号为 61 的样本点,对应的行向量可以写成  $\boldsymbol{x}^{(61)}$ 。

从几何视角来看, [5.0, 2.0] 在横轴的**正交投影** (orthogonal projection) 结果为 5.0, 代表该点的 横坐标为 5.0。[5.0, 2.0] 在纵轴的正交投影结果为 2.0, 代表其纵坐标为 2.0。

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

正交 (orthogonality) 是线性代数的概念,是垂直的推广。正交投影很好理解,即原数据点和投影点连线垂直于投影点所在直线或平面。打个比方,头顶正上方阳光将物体影子投影在地面,而阳光光线垂直于地面。不特别强调的话,本书的投影均指正交投影。

从集合视角来看,(5.0, 2.0) 属于平面  $\mathbb{R}^2$  ,即(5.0, 2.0)  $\in \mathbb{R}^2$  。图 6 中整团数据云都属于  $\mathbb{R}^2$  。 再者,如图 6 所示,从向量角度来看,行向量 [5.0, 2.0] 在横轴上投影的向量为 [5.0, 0],在纵轴上投影的向量为 [0, 2.0]。而 [5.0, 0] 和 [0, 2.0] 两个向量合成就是 [5.0, 2.0] = [5.0, 0] + [0, 2.0]。

再进一步,将图 6 整团数据云全部正交投影到横轴,得到图 7 。图 7 中  $\times$  代表的数据实际上就是鸢尾花数据集第一列花萼长度数据。图 7 中横轴相当于一个一维空间,即数轴  $\mathbb R$  。

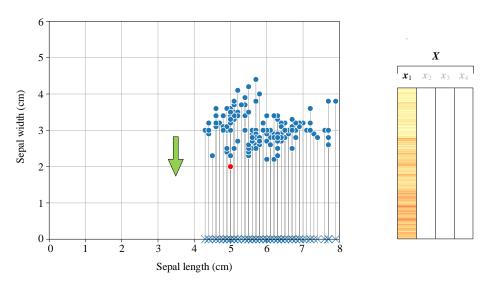


图 7. 二维散点正交投影到横轴

我们也可以把整团数据云全部投影在纵轴,得到图 8。图中的 × 是鸢尾花数据第二列花萼宽度数据。

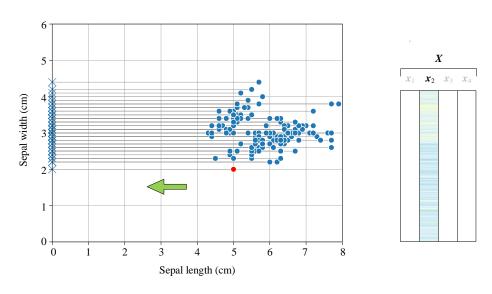


图 8. 二维散点正交投影到纵轴

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

#### 投影到一条过原点的斜线

你可能会问,是否可以将图7中所有点投影在一条斜线上?

答案是肯定的。

如图 9 所示,鸢尾花数据投影到一条斜线上,这条斜线通过原点和横轴夹角  $15^{\circ}$ 。观察图 9,我们已经发现投影点似乎是  $x_1$  和  $x_2$  的某种组合。也就是说, $x_1$  和  $x_2$  分别贡献  $v_1x_1$  和  $v_2x_2$ ,两种成分合成  $v_1x_1 + v_2x_2$  就是投影点坐标。 $v_1x_1 + v_2x_2$  也叫**线性组合** (linear combination)。

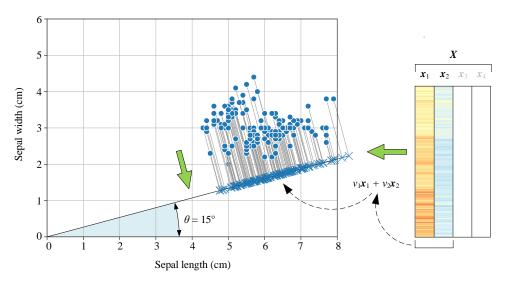
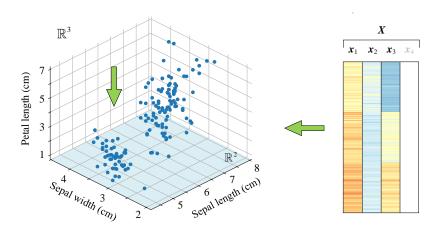


图 9. 二维散点正交投影到一条斜线

大家可能会问,怎么计算图 9 中投影点坐标?这种几何变换有何用途?这是本书第 9、10 章要回答的问题。

#### 三维散点图、成对特征散点图

取出鸢尾花前三个特征 (花萼长度、花萼宽度、花瓣长度) 对应的数据,并在三维空间  $\mathbb{R}^3$  绘制散点图,得到图 10。而图 6 相当于图 10 在水平面 (浅蓝色背景) 正交投影结果。



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. 鸢尾花前三个特征数据散点图

回顾本系列丛书《数学要素》一册介绍过的成对特征散点图,具体如图 11 所示。成对特征散点图不但可视化鸢尾花四个特征 (花萼长度、花萼宽度、花瓣长度和花瓣宽度),通过散点颜色还可以展示鸢尾花三个类别 (山鸢尾、变色鸢尾、维吉尼亚鸢尾)。图 11 中的每一幅散点图相当于四维空间数据在不同平面上的投影结果。

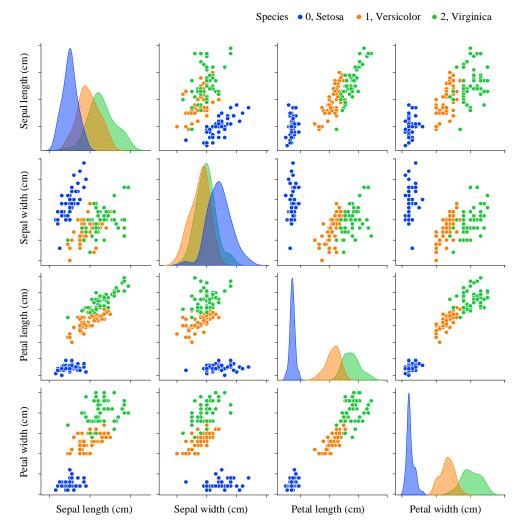


图 11. 鸢尾花数据成对特征散点图,考虑分类标签,图片来自《数学要素》

#### 统计视角: 移动向量起点

如图 12 所示,本节前文行向量的起点都是原点,即零向量  $\boldsymbol{\theta}$ 。而平面  $\mathbb{R}^2$  这个二维空间则"装下"了这 150 个行向量。

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

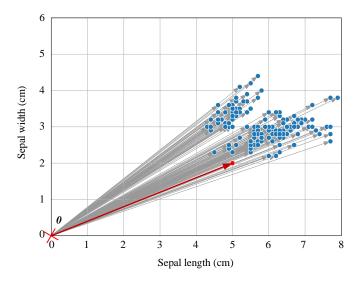


图 12. 向量起点为原点

但是,统计视角下,向量的起点移动到了数据**质心** (centroid)。所谓数据质心就是数据每一特征均值构成的向量。

这一点也不难理解,大家回想一下,我们在计算方差、均方差、协方差、相关性系数等统计度量时,都会去均值。从向量角度来看,这相当于移动向量起点。

如图 13 所示,将向量的起点移动到质心后,向量的长度、绝对角度(比如,和坐标系横轴夹角)、相对角度(向量两两之间的夹角)都发生了显著变化。

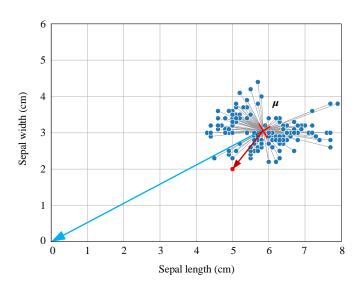


图 13. 向量起点为质心

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

将图 13 整团数据云质心平移到原点,这个过程就是去均值过程,结果如图 14 所示。数据矩阵 X 去均值化得到的数据矩阵记做  $X_c$ ,显然  $X_c$  的质心位于原点 0。去均值并不影响数据的单位,图 14 横轴、纵轴的单位还都是厘米。

一观察图11, 我们发现,如果考虑数据标签的话,每一类标签样本数据都有自己质心,叫做分类质心,这是本书第22章要讨论的话题。此外,本书最后三章——数据三步曲——会把数据、矩阵、向量、矩阵分解、空间、优化、统计等板块联结起来。

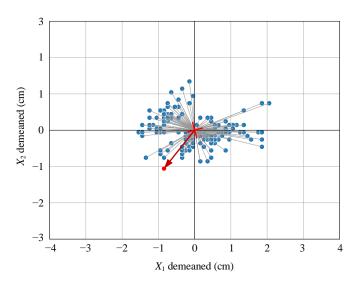


图 14. 数据去均值化

## 1.4 有向量的地方,就有空间

#### 从线性方程组说起

从代数视角来看,**矩阵乘法** (matrix multiplication) 代表**线性映射** (linear mapping)。比如,在  $A_{m \times n} x_{n \times 1} = b_{m \times 1}$  中矩阵  $A_{m \times n}$  扮演的角色就是完成  $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$  线性映射。列向量  $x_{n \times 1}$  在  $\mathbb{R}^n$  中,列向量  $b_{m \times 1}$  在  $\mathbb{R}^m$  中。

 $A_{m \times n} x_{n \times 1} = b_{m \times 1}$  也叫做**线性方程组** (system of linear equations)。在本系列丛书《数学要素》"鸡兔同笼三部曲"中,我们用线性方程组解决过鸡兔同笼问题。下面简单回顾一下。

《孙子算经》这样引出鸡兔同笼问题:"今有雉兔同笼,上有三十五头,下有九十四足,问雉兔各几何?"

将这个问题写成线性方程组:

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

$$\begin{cases} 1 \cdot x_1 + 1 \cdot x_2 = 35 \\ 2 \cdot x_1 + 4 \cdot x_2 = 94 \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 35 \\ 94 \end{bmatrix}$$

$$(3)$$

即:

$$Ax = b \tag{4}$$

未知变量构成的列向量x可以利用下式求解:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 35 \\ 94 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & -0.5 \\ -1 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 35 \\ 94 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 23 \\ 12 \end{bmatrix}$$
 (5)

(5) 用到了矩阵乘法 (matrix multiplication)、矩阵逆 (matrix inverse)。本书第 4、5、6 三章将介绍矩阵相关运算,居于核心的运算当然是矩阵乘法。

#### 几何视角

从几何视角来看,(3) 中矩阵 A 完成的是**线性变换** (linear transformation)。如图 15 所示,矩阵 A 把  $e_1$  和  $e_2$  构成的方方正正的方格,变成平行四边形网格,对应的计算为:

$$\begin{bmatrix}
1 & 1 \\
2 & 4
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
1 \\
0
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
1 \\
2
\end{bmatrix}, \quad
\begin{bmatrix}
1 & 1 \\
2 & 4
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
0 \\
1
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
1 \\
4
\end{bmatrix}$$
(6)

而上式结果恰好是矩阵  $A = [a_1, a_2]$  的两个列向量  $a_1$  和  $a_2$ 。

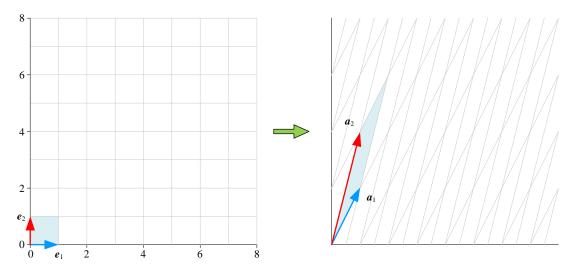


图 15. 矩阵 A 完成的线性变换

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

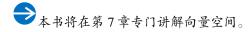
欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com

观察图 15 左图,整个直角坐标系整个方方正正的网格由  $[e_1,e_2]$  张成,就好比  $e_1$  和  $e_2$  是撑起这个二维空间的"骨架"。再看图 15 右图, $[a_1,a_2]$  同样张成了整个直角坐标系,不同的是网格为平行四边形。 $[e_1,e_2]$  和  $[a_1,a_2]$  都是空间  $\mathbb{R}^2$  的基底 (base)。

将A写成 [ $a_1, a_2$ ]. 展开(4)得到:

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1 \boldsymbol{a}_1 + x_2 \boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{b}$$
 (7)

上式代表基底 [a1, a2] 中两个基底向量的线性组合。



#### 从正圆到旋转椭圆

圆锥曲线,特别是椭圆,在本系列丛书扮演重要角色,这一切都源于多元高斯分布概率密度函数。而线性变换和椭圆又有千丝万缕的联系。

如图 16 所示,同样利用 (3) 中矩阵 A,我们可以把一个单位圆转化为旋转椭圆。图 16 中,任意向量 x 起点为原点,终点落在单位圆上,经过 A 的线性变换变成 y = Ax。

图 16 旋转椭圆的半长轴长度约为 4.67, 半短轴长度约为 0.43, 半短轴和横轴夹角约为-16.85°。要完成这些计算,我们需要线性代数中一个利器——特征值分解 (eigen decomposition)。

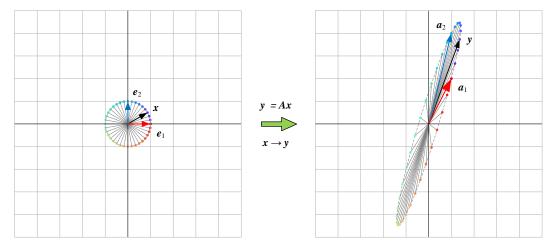


图 16. 矩阵 A 将单位圆转化为旋转椭圆

#### 特征值分解

本书读者对特征值分解并不陌生,如图 17 所示,我们在本系列丛书《数学要素》鸡兔同笼三部"鸡兔互变"中简单聊过特征值分解,大家如果忘记了,建议回顾一下。

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

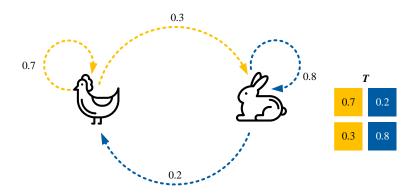


图 17. 鸡兔同笼三部曲中"鸡兔互变",图片来自本系列丛书《数学要素》第 25 章

剧透一下,鸢尾花数据矩阵 X 本身并不能完成特征值分解。但是图 21 中的格拉姆矩阵  $G = (X^TX)$  可以完成特征值分解,分解过程如图 18 所示。请大家特别注意图 18 中的矩阵 V 。正如图 15 右图中  $A = [a_1, a_2]$  张成了一个平面,矩阵  $V = [v_1, v_2, v_3, v_4]$  则张成了一个 4 维空间!

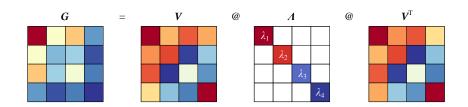


图 18. 矩阵 X 的格拉姆矩阵的特征值分解

本书第 13、14 章专门探讨特征值分解。此外,本书将在第 20、21 章利用线性代数工具分析圆锥曲线和二次曲面。

#### 奇异值分解

在**矩阵分解** (matrix decomposition) 这个工具库中,最全能的工具叫**奇异值分解** (Singular Value Decomposition, SVD)。因为不管形状如何,任何实数矩阵都可以完成奇异值分解。

图 19 所示为对鸢尾花数据矩阵的 SVD 分解,这幅图中的 U 和 V 都各自张成不同的空间。

◆本书第15、16章专门讲解奇异值分解,第23章则利用SVD分解引出四个空间。

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

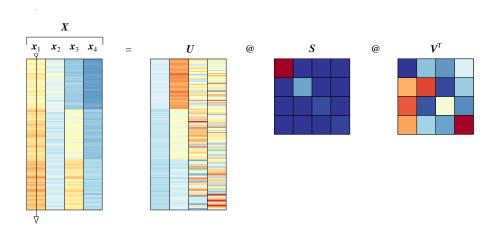


图 19. 对矩阵 X 进行 SVD 分解

### 1.5 有数据的地方,肯定有统计

前文提到,图 20 所示鸢尾花数据每一列代表鸢尾花的一个特征,比如花萼长度 (第 1 列,列向量  $x_1$ )、花萼宽度 (第 2 列,列向量  $x_2$ )、花瓣长度 (第 3 列,列向量  $x_3$ ) 和花瓣宽度 (第 4 列,列向量  $x_4$ )。这些列向量可以看成是  $X_1$ 、 $X_2$ 、 $X_3$ 、 $X_4$ 四个随机变量的样本值集合。

从统计视角来看,我们可以计算样本数据各个特征的均值  $(\mu_i)$ ,计算不同特征上样本数据的均方差  $(\sigma_i)$ 。图 20 中四副子图中的曲线代表各个特征样本数据的概率密度估计 (probability density estimation) 曲线。有必要的话,我们还可以在图中标出  $\mu_i$ 、 $\mu_i \pm \sigma_i$ 、 $\mu_i \pm 2\sigma_i$ 对应的位置。

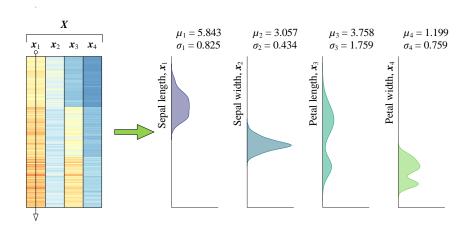


图 20. 鸢尾花数据每个特征的基本统计描述

实际应用时,我们还会对原始数据进行处理,常见的操作有**去均值** (demean)、**标准化** (standardization) 等。

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

对于多个特征之间的关系,我们可以采用**格拉姆矩阵** (Gram matrix)、**协方差矩阵** (covariance matrix)、**相关性系数矩阵** (correlation matrix) 等矩阵来描述。

图 21 所示为本书后续要用到的鸢尾花数据矩阵 X 衍生得到的几种矩阵。注意,图 2 和图 21 矩阵 X 热图采用不同的色谱值。

本书第 22 章将介绍如何获得图 21 所示这些矩阵,本书第 24 章将探讨图 21 主要矩阵和各种矩阵分解 (matrix decomposition) 之间有趣关系。

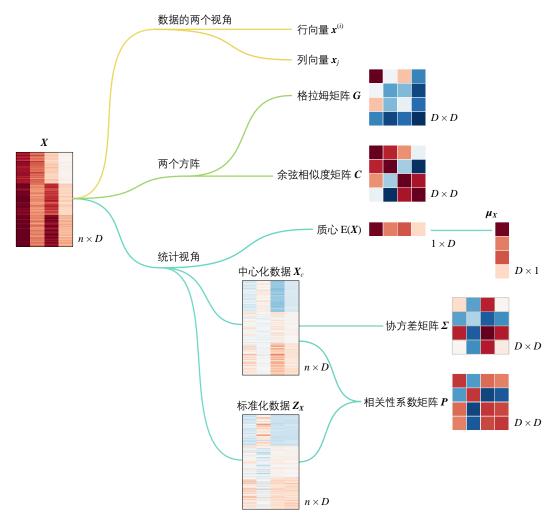


图 21. 鸢尾花数据衍生得到的几个矩阵,来自本书第 24 章



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

本章只配套一个代码文件,Streamlit\_Bk4\_Ch1\_01.py。这段代码中,我们用 Streamlit 和 Plotly 分别绘制了鸢尾花数据集的热图、平面散点图、三维散点图、成对特征散点图。这四幅图都是可交互图像。



本章以向量为主线,回顾了《数学要素》"鸡兔同笼三部曲"的主要内容,预告了本书核心话题。目前不需要大家理解本章提到所有术语,只希望大家记住以下几句话:

有数据的地方,就有矩阵!

有矩阵的地方,就有向量!

有向量的地方,就有几何!

有向量的地方,就有空间!

有数据的地方, 肯定有统计!



对线性代数概念感到困惑的读者,推荐大家看看 3Blue1Brown 制作的视频。很多视频网站上都可以找到译制视频。如下为 3Blue1Brown 线性代数部分网页入口:

https://www.3blue1brown.com/topics/linear-algebra