2 向量运算

Vector Calculations

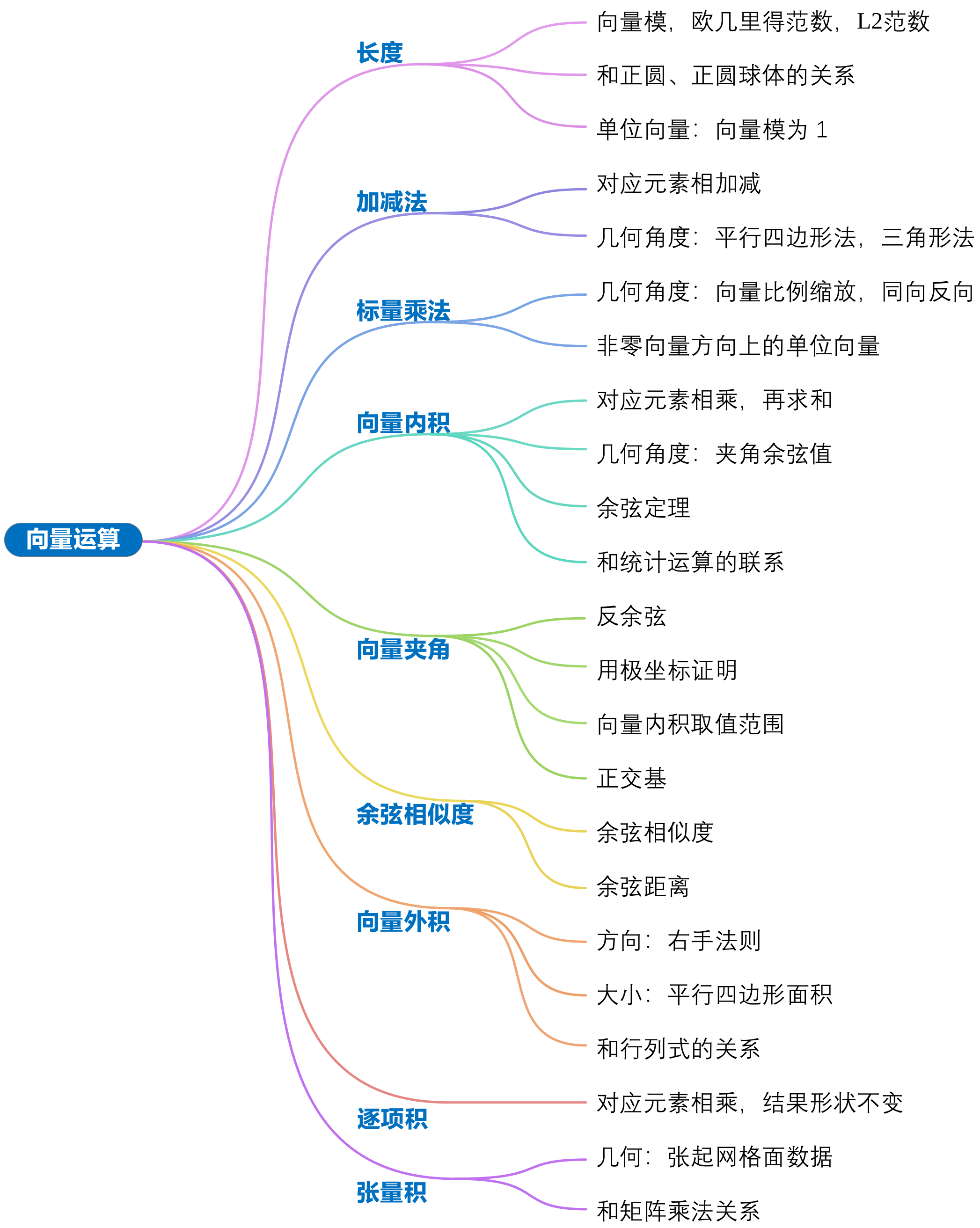
从几何和数据角度解释

几何——指向真理之乡，创造哲学之魂。

Geometry will draw the soul toward truth and create the spirit of philosophy.

—— 柏拉图 (Plato) | 古希腊哲学家 | 424/423 ~ 348/347 BC

- `numpy.arccos()` 计算反余弦
- `numpy.cross()` 计算列向量和行向量的向量积
- `numpy.dot()` 计算向量内积。值得注意的是，如果输入为一维数组，`numpy.dot()` 输出结果为向量内积；如果输入为矩阵，`numpy.dot()` 输出结果为矩阵乘积，相当于矩阵运算符@
- `numpy.linalg.norm()` 计算向量范数
- `numpy.multiply()` 计算向量逐项积
- `numpy.outer()` 计算外积、张量积
- `numpy.vdot()` 计算两个向量的向量内积。如果输入是矩阵，矩阵会按照先行后列顺序展开成向量之后，再计算向量内积
- `scipy.spatial.distance.cosine()` 计算余弦距离
- `seaborn.heatmap()` 绘制热图
- `sklearn.datasets.load_iris()` 加载鸢尾花数据


向量运算
长度
向量模，欧几里得范数，L2范数
和正圆、正圆球体的关系
单位向量：向量模为 1
加减法
对应元素相加减
几何角度：平行四边形法，三角形法
标量乘法
几何角度：向量比例缩放，同向反向
非零向量方向上的单位向量
向量内积
对应元素相乘，再求和
几何角度：夹角余弦值
余弦定理
和统计运算的联系
向量夹角
反余弦
用极坐标证明
向量内积取值范围
正交基
余弦相似度
余弦相似度
余弦距离
向量外积
方向：右手法则
大小：平行四边形面积
和行列式的关系
逐项积
对应元素相乘，结果形状不变
张量积
几何：张起网格面数据
和矩阵乘法关系

2.1 行向量、列向量

上一章提到，向量要么一行多列、要么一列多行，因此向量可以看做是特殊的矩阵——**一维矩阵** (one-dimensional matrix)。

一行多列的向量是**行向量** (row vector)，一列多行的向量叫**列向量** (column vector)。

白话讲，行向量将 n 个元素排成一行，结构为 $1 \times n$ (代表 1 行、n 列)，如图 1 (a)。下式行向量 $\boldsymbol{a}$ 为 1 行 4 列：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix} \tag{1}$$

注意，在 Numpy 中，行向量也是二维，不同于一维数组。下一节将详细介绍。

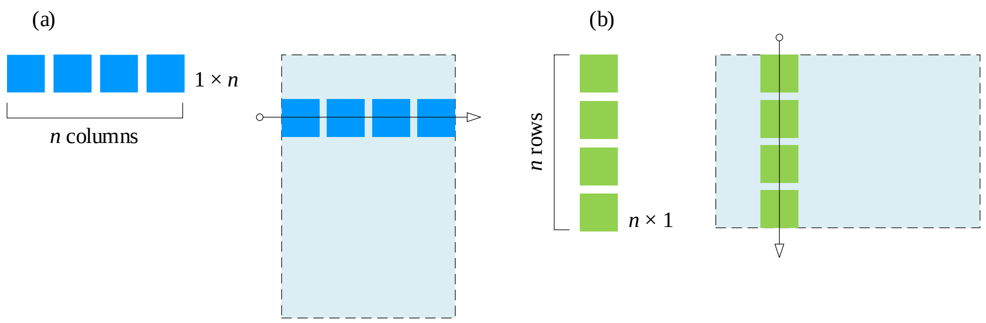


图 1. 行向量和列向量

列向量将 n 个元素排成一列，结构为 $n \times 1$ (代表 n 行，1 列)，如图 1 (b)。

举个例子，下式列向量 $\boldsymbol{b}$ 为 4 行 1 列：

$$\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix} \tag{2}$$

注意，不加说明时，本书中向量一般指的是列向量。

而一个矩阵可以视作由若干行向量或列向量整齐排列而成。如图 2 所示，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一行是一个行向量，代表一个观察值；$\boldsymbol{X}$ 的每一列为一个列向量，代表某个特征上的所有样本数据。

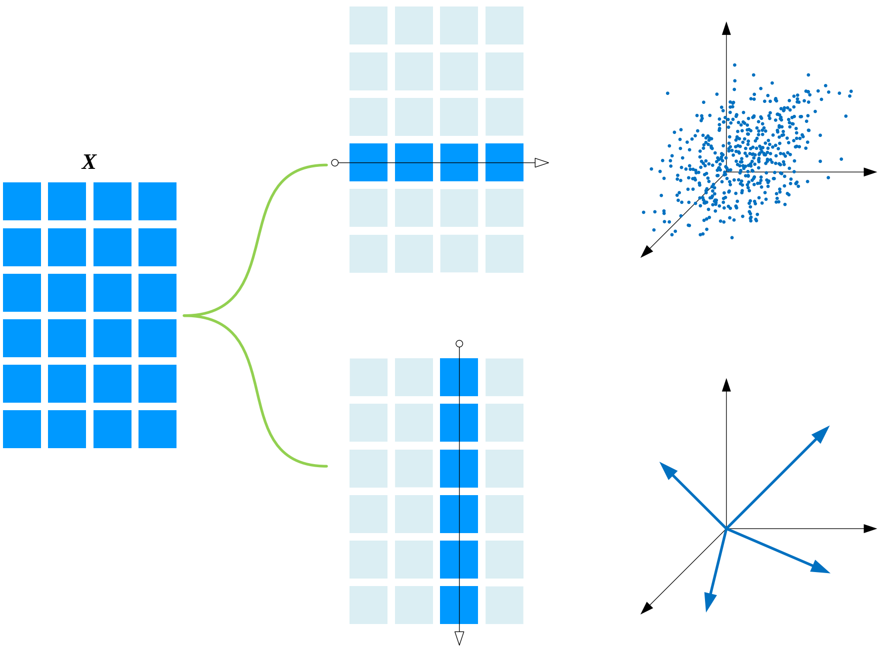


图 2. 观察数据的两个角度

行向量：一行多列，一个样本数据点

如图 3 所示，行向量**转置** (transpose) 得到列向量，反之亦然。转置运算符号为正体上标 $^{\mathrm{T}}$。

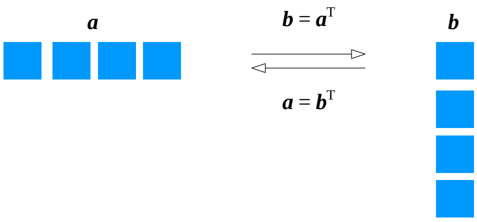


图 3. 行向量的转置是列向量

表 1 所示为利用 Numpy 构造行向量几种常见方法。可以用 len(a) 计算向量的长度，即向量中元素个数。

表 1. 构造行向量

代码	注意事项
`a = numpy.array([4,3])`	严格地说，这种方法产生的并不是行向量；运行 a.ndim 发现 a 只有一个维度；因此，转置 numpy.array([4,3]).T 得到的仍然是一维数组，只不过默认展示方式为行向量。

`a = numpy.array([[4,3]])`	运行 `a.ndim` 发现 a 有二个维度；这个行向量转置 `a.T` 可以获得列向量；`a.T` 求 a 转置，等价于 `a.transpose()`。
`a = numpy.array([4,3], ndmin=2)`	`ndmin=2` 设定数据有两个维度；转置 `a.T` 可以获得列向量。
`a = numpy.r_['r', [4,3]]`	`numpy.r_[]` 将一系列的数组合并；`'r'` 设定结果以行向量（默认）展示，比如 `numpy.r_[numpy.array([1,2]), 0, 0, numpy.array([4,5])]` 默认产生行向量。
`a = numpy.array([4,3]).reshape((1, -1))`	`reshape()` 按某种形式重新排列数据；`-1` 自动获取数组长度 n。
`a = numpy.array([4, 3])[None, :]`	按照 `[None, :]` 形式广播数组；`None` 代表 `numpy.newaxis`，增加新维度。
`a = numpy.array([4, 3])[numpy.newaxis, :]`	等同于上一例。

前文提到，本书常用 $\boldsymbol{X}$ 表达数据矩阵，$\boldsymbol{X}$ 的每一行代表一个数据点。为了方便区分，构造 $\boldsymbol{X}$ 的一系列行向量序号采用“上标加括号”方式，比如 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 代表 $\boldsymbol{X}$ 的第一行行向量。

如图 4 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写作：

$$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}^{(1)}\\ \boldsymbol{x}^{(2)}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}^{(6)}\end{bmatrix} \tag{3}$$

⚠ 再次强调，数据分析偏爱用行向量表达坐标点。

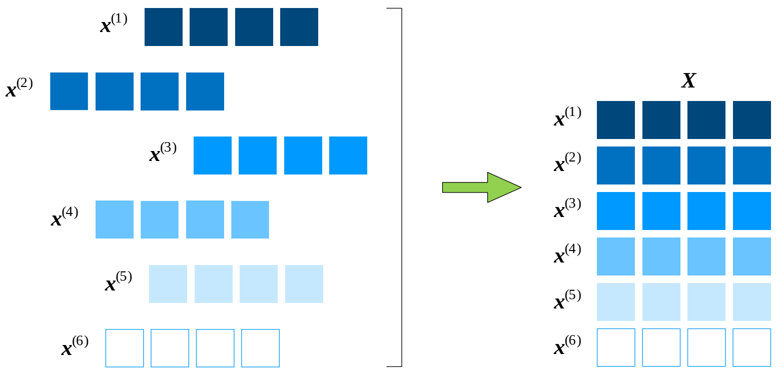


图 4. 矩阵由一系列行向量构造

列向量：一列多行，一个特征

数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一列代表一个特征，因此列向量又常称作**特征向量** (feature vector)。

⚠ 注意，此特征向量不同于特征值分解 (eigen decomposition) 中的特征向量 (eigenvector)。

为了方便区分，构造 $\boldsymbol{X}$ 的列向量序号采用下标表达，比如 $\boldsymbol{x}_1$。如图 5 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 看做是 4 个等长列向量整齐排列得到：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 & \boldsymbol{x}_4 \end{bmatrix} \tag{4}$$

数据分析偏爱列向量 ($\boldsymbol{x}_j$) 表达特征，它对应概率统计的某个随机变量 (X_j)，或者代数中的变量 (x_j)。

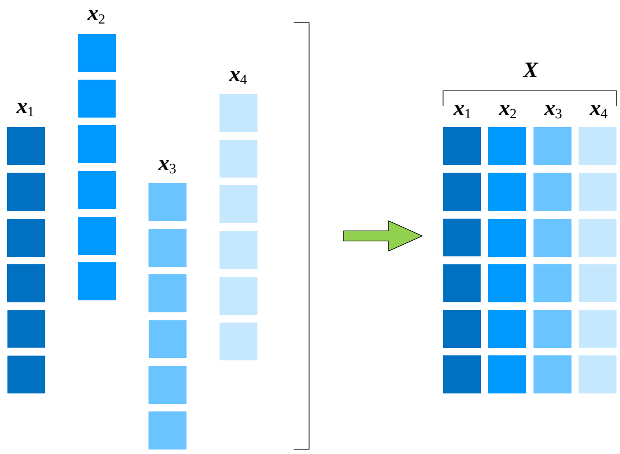


图 5. 矩阵由一排列向量构造

表 2 总结 Numpy 构造列向量几种常见方法。

表 2. 构造列向量

代码	注意事项
`a = numpy.array([[4], [3]])`	运行 `a.ndim` 发现 a 有二个维度；`numpy.array([[4], [3]]).T` 获得行向量
`a = numpy.r_['c', [4,3]]`	`numpy.r_[]` 将一系列的数组合并；`'c'` 设定结果以列向量展示，比如 `np.r_['c', numpy.array([1,2]), 0, 0, numpy.array([4,5])]` 默认产生行向量
`a = numpy.array([4,3]).reshape((-1, 1))`	`reshape()` 按某种形式重新排列数据；`-1` 自动获取数组长度 n
`a = numpy.array([4, 3])[:, None]`	按照 `[:, None]` 形式广播数组；`None` 代表 `numpy.newaxis`，增加新维度
`a = numpy.array([4, 3])[:, numpy.newaxis]`	等同于上一例

特殊列向量

全零列向量 (zero column vector) $\boldsymbol{0}$，是指每个元素均为 0 的列向量：

$$\boldsymbol{0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{5}$$

代码 `numpy.zeros((4,1))` 可以生成 4 × 1 全 0 列向量。我们会用 $\boldsymbol{0}$ 代表多维直角坐标系的原点。

全 1 列向量 (all-ones column vector) $\boldsymbol{1}$，是指每个元素均为 1 的列向量：

$$\boldsymbol{1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

代码 `numpy.ones((4,1))` 可以生成 4 × 1 全 1 列向量。

再次强调，一般情况，本书默认向量为列向量，除非具体说明。

全 1 列向量 $\boldsymbol{1}$ 在矩阵乘法中有特殊的地位，本书第 5、22 章将分别从矩阵乘法和统计两个角度讲解。

2.2 向量长度：模，欧氏距离，L^2 范数

向量长度 (length of a vector) 又叫做**向量模** (vector norm)、**欧几里得距离** (Euclidean distance)、**欧几里得范数** (Euclidean norm) 或 **L^2 范数** (L2-norm)。

给定向量 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 的模为：

$$\|\boldsymbol{a}\| = \|\boldsymbol{a}\|_2 = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \cdots a_n^2} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{8}$$

注意，$\|\boldsymbol{a}\|_2$ 下角标 2，代表 L^2 范数。没有特殊说明，$\|\boldsymbol{a}\|$ 默认代表 L^2 范数。

L^2 范数是 L^p 范数的一种，本书第 3 章还要介绍其他各种范数。

二维向量的模

特别地，对于如下二维向量：

$$a = [a_1 \quad a_2]^{\mathrm{T}} \tag{9}$$

二维向量 a 的 L^2 范数为：

$$\|a\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2} \tag{10}$$

图 6 给出向量 a 和 b，它们的模可以这样计算得到：

$$\begin{aligned} \|a\| &= \sqrt{4^2 + 3^2} = \sqrt{25} = 5 \\ \|b\| &= \sqrt{(-3)^2 + 4^2} = \sqrt{25} = 5 \end{aligned} \tag{11}$$

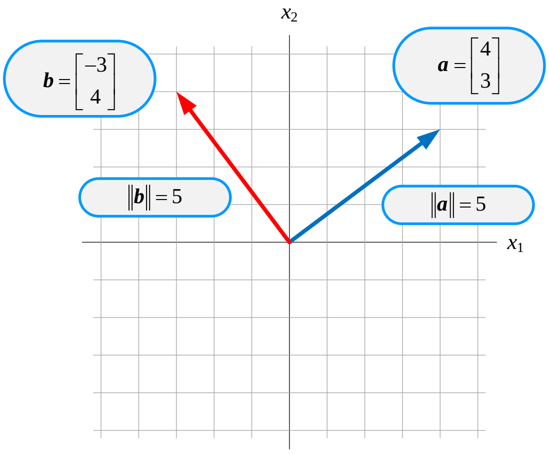


图 6. 向量 a 和 b 的模

Bk4_Ch2_01.py 绘制图 6 所示向量。matplotlib.pyplot.quiver() 绘制箭头图。

二维向量 a 和横轴夹角可以通过反正切求解：

$$\theta_a = \arctan\left(\frac{a_2}{a_1}\right) \tag{12}$$

上述角度直接和参考系关联，因此可以视作“绝对夹角”。本章后续将介绍如何用向量内积求两个向量之间的“相对夹角”。

函数 `numpy.linalg.norm()` 默认计算 L^2 范数；也可以用 `numpy.sqrt(np.sum(a**2))` 计算向量 $\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数。`Bk4_Ch2_02.py` 计算图 6 中向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 模。

等距线

值得一提的是，和 $\|\boldsymbol{a}\|$ 等长的二维向量，如果起点重合，它们的终点位于同一个圆上，如图 7 (a) 所示。看到这里大家是否想到了本系列丛书《数学要素》第 7 章讲过的“等距线”。

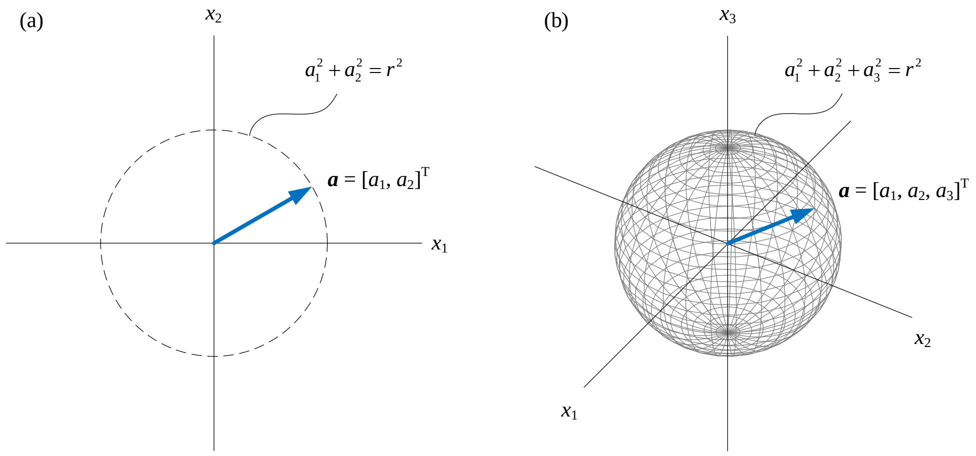


图 7. 等 L^2 范数向量

如图 8 所示，向量 $\boldsymbol{x}$ 的模长度 $\|\boldsymbol{x}\|$ 取得不同数值时，我们可以得到一系列同心圆：

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = c \tag{13}$$

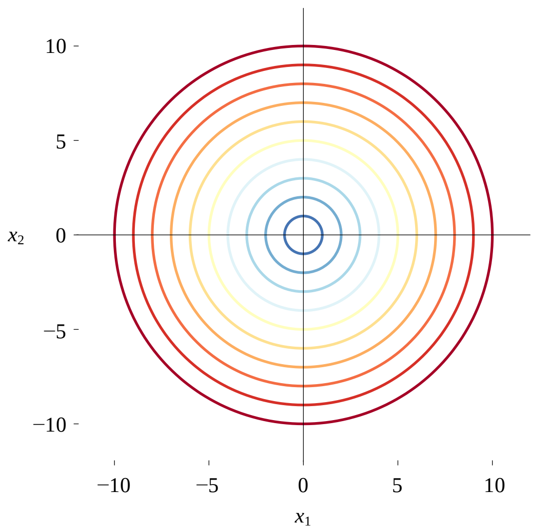


图 8. 起点为 $\boldsymbol{0}$、相等 L^2 范数向量终点位于一系列同心圆上

Bk4_Ch2_03.py 绘制图 8。

三维向量的模

类似地，对于三维向量：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{14}$$

三维向量 $\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数为：

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2} \tag{15}$$

图 7 (b) 所示为起点相同的等长三维向量终点位于同一正圆球面上。

单位向量

长度为 1 的向量被称作**单位向量** (unit vector)。

非 $\boldsymbol{0}$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 除以自身的模得到 **$\boldsymbol{a}$ 方向上的单位向量** (unit vector in the direction of vector $\boldsymbol{a}$)：

$$\hat{\boldsymbol{a}} = \frac{\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|} \tag{16}$$

$\hat{\boldsymbol{a}}$ 读作 “vector a hat”。`a/numpy.linalg.norm(a)` 可以计算非 $\boldsymbol{0}$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 方向上的单位向量。

图 9 (a) 所示平面直角坐标系，起点位于原点的单位向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^{\mathrm{T}}$ 终点位于**单位圆** (unit circle) 上，对应的解析式为：

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = 1 \quad \Rightarrow \quad x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{17}$$

这无数个单位向量中，有两个单位向量最为特殊——$\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$) 和 $\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$)。如图 9 (b) 所示平面直角坐标系中，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 分别为沿着 x_1 (水平) 和 x_2 (竖直) 方向的单位向量：

$$\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{18}$$

显然，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 相互垂直。

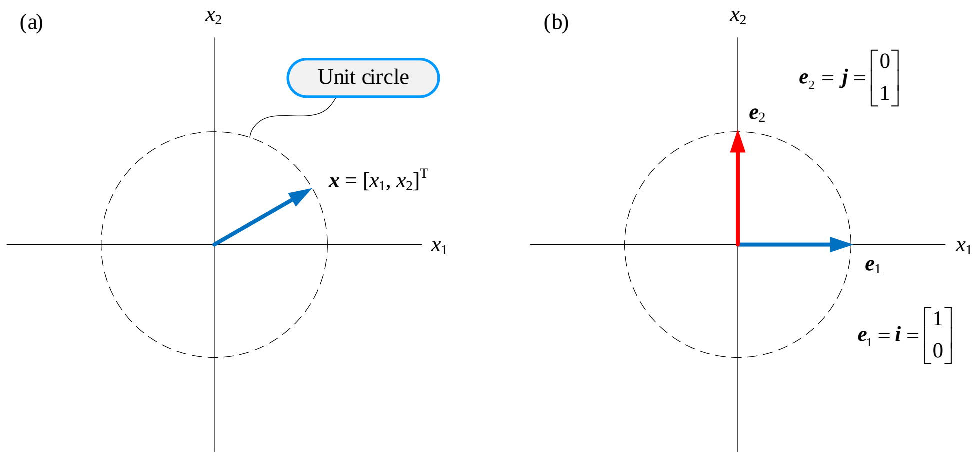


图 9. 单位向量

张成

图 6 给出向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 可以用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 合成：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} &= 4\boldsymbol{e}_1 + 3\boldsymbol{e}_2 \\ \boldsymbol{b} &= -3\boldsymbol{e}_1 + 4\boldsymbol{e}_2 \end{aligned} \tag{19}$$

(19) 用到的便是向量加减法，这是下一节要介绍的内容。

图 6 这个平面就是用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 张成的。白话说，$\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 好比经纬度，可以定位地表任意一点。比如，$\mathbb{R}^2$ 平面上的任意一点都可以写成：

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 \tag{20}$$

从集合运算角度，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2$。

本书第 7 章将讲解“张成 (span)”、向量空间等概念。

三维直角坐标系

三维直角坐标系中，$\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$)、$\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) 分别为沿着 x_1、x_2 和 x_3 单位向量：

$$\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{21}$$

$\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$)、$\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) 两两相互垂直。

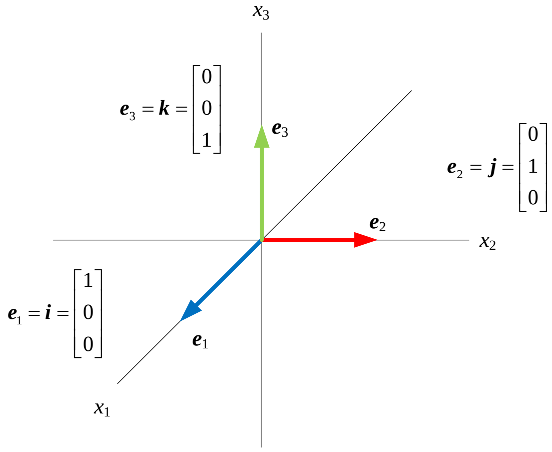


图 10. 三维空间单位向量

同理，图 10 这个三维空间是用 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$ 张成的。白话说，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$、$\boldsymbol{e}_3$ 相当于经度、维度、海拔，定位能力从地表扩展到整个地球空间。

$\mathbb{R}^3$ 空间任意一点可以写成：

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3 \tag{22}$$

而上式中的 (x_1, x_2, x_3) 代表坐标点。

此外，大家可能已经注意到，$\boldsymbol{e}_1$ 可以用不同的形式表达，比如：

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{23}$$

上式中几个 $\boldsymbol{e}_1$ 等价，相当于在不同维度空间中的 $\boldsymbol{e}_1$。这些 $\boldsymbol{e}_1$ 之间的关系是，从低维到高维或从高维到低维投影。

本书将在第 8、9、10 三章深入探讨投影这一重要线性代数工具。

2.3 加减法：对应位置元素分别相加减

从数据角度看，两个等长列向量相加，结果为对应位置元素分别相加，得到长度相同的列向量，比如下例：

$$\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} -2 \\ 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2+5 \\ 5-1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} \tag{24}$$

两个等长列向量相减，则是对应元素分别相减，得到等长列向量，比如下例：

$$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-2\\5\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}5\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2-5\\5-(-1)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-7\\6\end{bmatrix} \tag{25}$$

该原理也适用于等长行向量加减法。

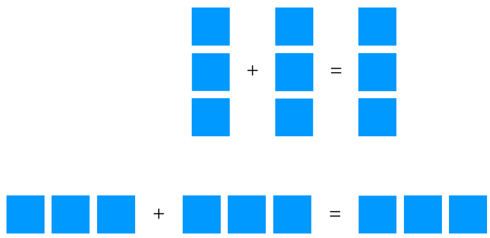


图 11. 数据角度看向量加法

几何视角

从几何角度看，**向量加法** (vector addition) 结果可以用**平行四边形法则** (parallelogram method) 或**三角形法则** (triangle method) 获得，具体如图 12 所示。

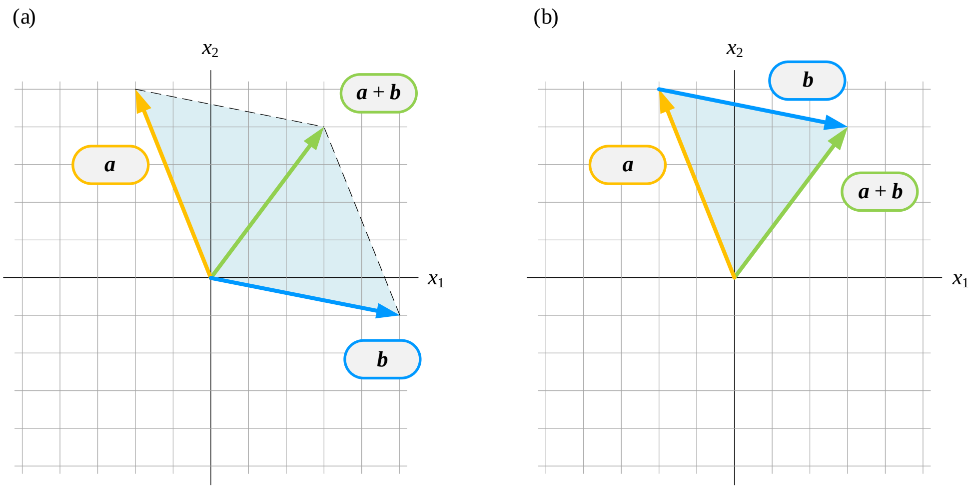


图 12. 几何角度看向量加法

向量减法 (vector subtraction)，向量 $\boldsymbol{a}$ 减去向量 $\boldsymbol{b}$，可以将向量 $\boldsymbol{b}$ 换向得到 $-\boldsymbol{b}$；然后再计算向量 $-\boldsymbol{b}$ 与向量 $\boldsymbol{a}$ 的和，即：

$$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}+(-\boldsymbol{b})=\begin{bmatrix}-2\\5\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}5\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-7\\6\end{bmatrix} \tag{26}$$

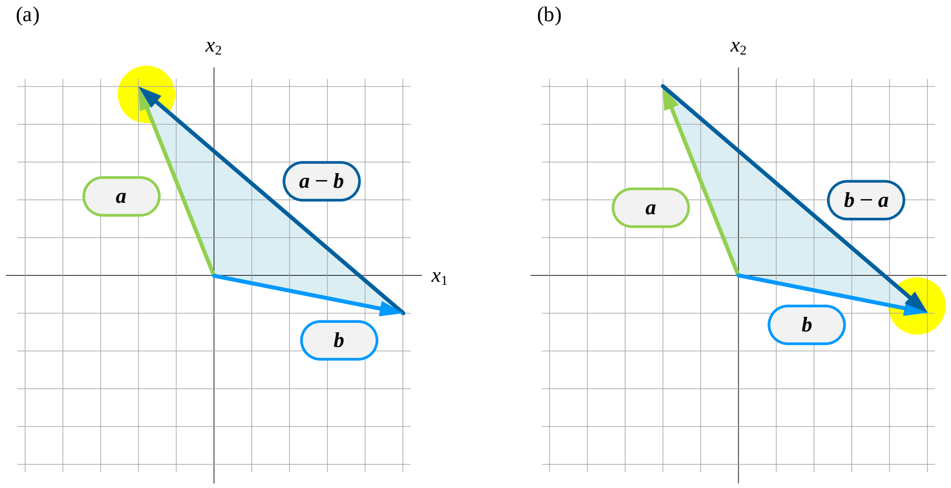


图 13. 几何角度向量减法

如图 13 所示，$\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a}$ 结果相反：

$$\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a}=-(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})=\begin{bmatrix}5\\-1\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}-2\\5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}7\\-6\end{bmatrix} \tag{27}$$

两个向量相同，当且仅当两者大小方向均相同。如果两个向量的大小相同但是方向相反，两者互为反向量。两个向量方向相同或相反，则称向量平行。

⚠ 注意，向量 $\boldsymbol{a}$ 减去向量 $\boldsymbol{b}$，结果 $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 对应向量箭头指向 $\boldsymbol{a}$ 终点；相反，向量 $\boldsymbol{b}$ 减去向量 $\boldsymbol{a}$ 得到 $\boldsymbol{b}-\boldsymbol{a}$ 指向 $\boldsymbol{b}$ 终点。

请大家注意以下向量加减法性质：

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\\&(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})+\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}+(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})\\&\boldsymbol{a}+(-\boldsymbol{a})=\boldsymbol{0}\end{aligned} \tag{28}$$

`Bk4_Ch2_04.py` 计算本节向量加减法示例。

2.4 标量乘法：向量缩放

向量标量乘法 (scalar multiplication of vectors) 指的是标量和向量每个元素分别相乘，结果仍为向量。

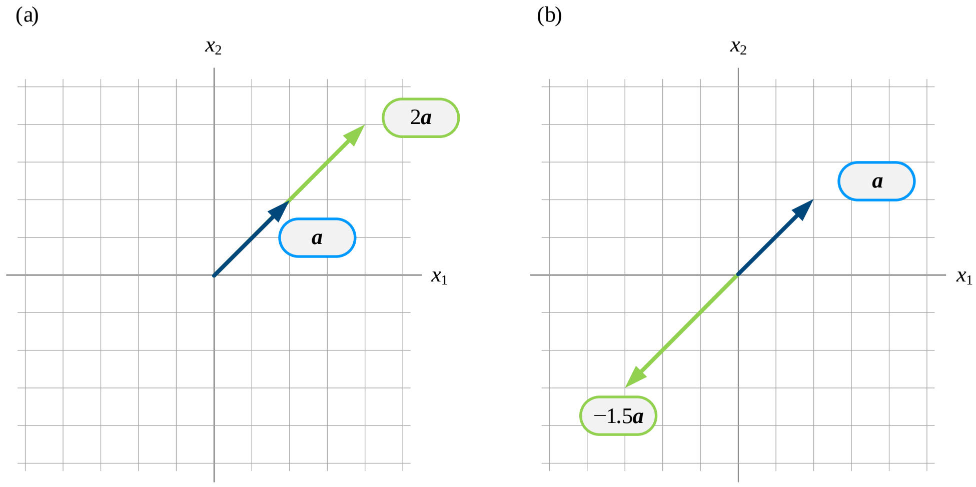


图 14. 向量标量乘法

从几何角度，标量乘法将向量按标量比例缩放，向量方向同向或反向，如图 14 所示。

Bk4_Ch2_05.py 完成图 14 中运算。

请大家注意以下标量乘法性质：

$$
\begin{aligned}
&(t+k)\boldsymbol{a}=t\boldsymbol{a}+k\boldsymbol{a}\\
&t(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})=t\boldsymbol{a}+t\boldsymbol{b}\\
&t(k\boldsymbol{a})=tk\boldsymbol{a}\\
&1\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}\\
&-1\boldsymbol{a}=-\boldsymbol{a}\\
&0\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}
\end{aligned}
\tag{29}
$$

其中，t 和 k 为标量。

2.5 向量内积：结果为标量

向量内积 (inner product)，又叫**标量积** (scalar product)，或**点积** (dot product)、点乘。向量内积的运算结果为标量，而非向量。

给定如下 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个等长列向量：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\
\boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}
\end{aligned}
\tag{30}
$$

列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的内积定义如下：

$$
\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \langle \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \ldots + a_n b_n \tag{31}
$$

(31) 定义也适用于两个等长行向量计算内积。

从代数角度看内积，两列或行位置相同的每对元素先求积，再对所有积求和，结果即为向量内积，如图 15 所示。

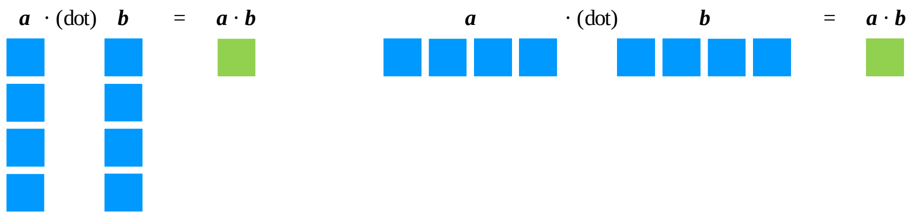


图 15. 向量内积运算

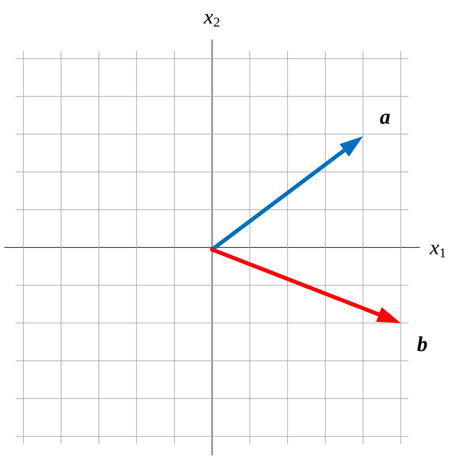


图 16. $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个平面向量

图 16 所示的两个列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的内积：

$$
\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 5 \\ -2 \end{bmatrix} = 4 \times 5 + 3 \times (-2) = 14 \tag{32}
$$

Bk4_Ch2_06.py 计算上述向量内积。

此外，还可以用 numpy.dot() 计算向量内积。值得注意的是，如果输入为一维数组，numpy.dot() 输出结果为内积。如果输入为矩阵，numpy.dot() 输出结果为矩阵乘积，相当于矩阵运算符@，比如 Bk4_Ch2_07.py 给出例子。

numpy.vdot() 函数也可以计算两个向量内积。如果输入是矩阵，矩阵会按照先行后列顺序展开成向量之后，再计算向量内积。Bk4_Ch2_08.py 给出示例。

常用的向量内积性质如下：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a} \\ &\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{c} \\ &(k\boldsymbol{a})\cdot(t\boldsymbol{b})=kt(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}) \end{aligned} \tag{33}$$

请读者格外注意以下几个向量内积运算和求和运算的关系：

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{1}\cdot\boldsymbol{x}=x_1+x_2+\cdots x_n=\sum_{i=1}^{n}x_i \\ &\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}=x_1^2+x_2^2+\cdots x_n^2=\sum_{i=1}^{n}x_i^2 \\ &\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{y}=x_1y_1+x_2y_2+\cdots x_ny_n=\sum_{i=1}^{n}x_iy_i \end{aligned} \tag{34}$$

其中，

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1 & x_2 & \cdots & x_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{1}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\end{bmatrix}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{y}=\begin{bmatrix}y_1 & y_2 & \cdots & y_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{35}$$

几何视角

如图 17，从几何角度看，向量内积相当于两个向量的长度 (模、L2 范数) 与它们之间夹角余弦的积：

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos\theta \tag{36}$$

注意，上式中 θ 代表向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的“相对夹角”。

此外，向量内积还可以从向量投影 (projection) 角度来解释，这是本书第 9 章要介绍的内容。

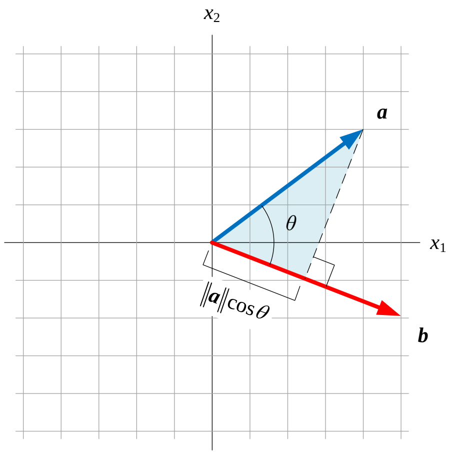


图 17. 向量内积和夹角余弦之间关系

$\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数也可以通过向量内积求得：

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}} = \sqrt{\langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle} \tag{37}$$

(37) 左右等式平方得到：

$$\|\boldsymbol{a}\|^2 = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} = \langle \boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle \tag{38}$$

柯西-施瓦茨不等式

观察 (36)，我们可以发现 $\cos\theta$ 的取值范围为 [−1, 1]，因此 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 内积取值范围如下：

$$-\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \le \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} \le \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \tag{39}$$

图 18 所示为 7 个不同向量夹角状态。

$\theta = 0°$时，$\cos\theta = 1$，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 同向，此时向量内积最大；$\theta = 180°$时，$\cos\theta = -1$，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 反向，此时向量内积最小。

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 垂直，即**正交** (orthogonal)，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角为 90°；$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 内积为 0：

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos 90° = 0 \tag{40}$$

当两个向量互相垂直时，向量内积为零。

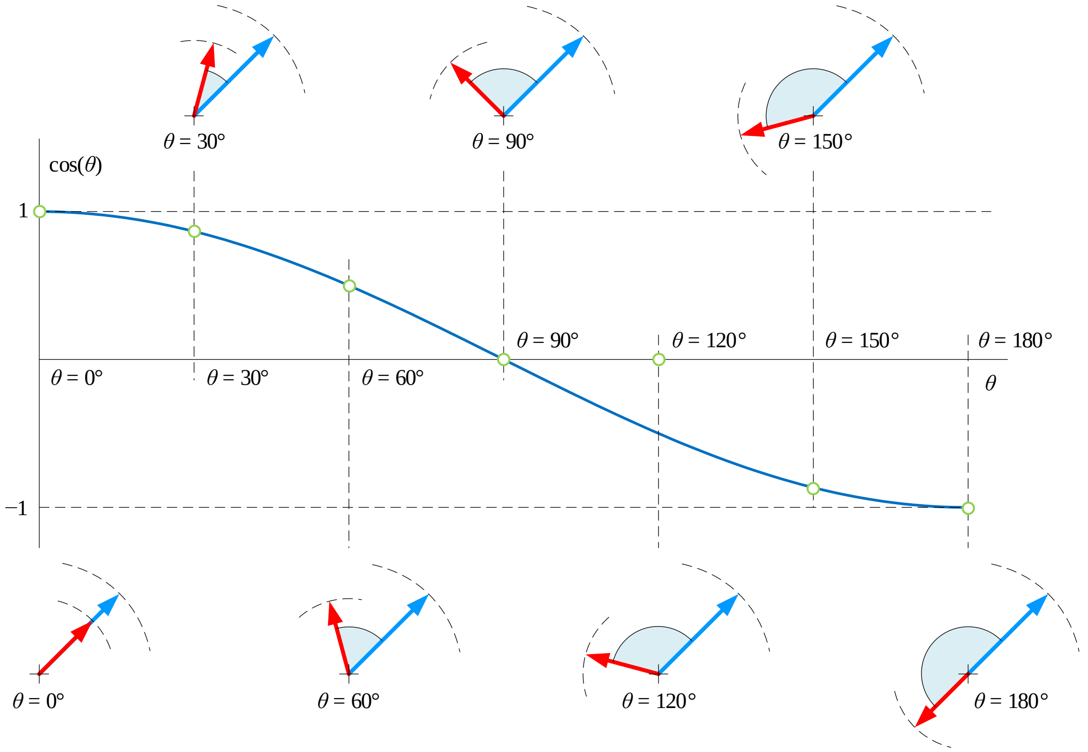


图 18. 向量夹角

有了以上分析，我们就可以引入一个重要的不等式——柯西-施瓦茨不等式 (Cauchy–Schwarz inequality)：

$$(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})^2 \le \|\boldsymbol{a}\|^2\|\boldsymbol{b}\|^2 \tag{41}$$

即：

$$|\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}| \le \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \tag{42}$$

用尖括号来表达向量内积，(41) 可以写成：

$$\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle^2 \le \langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle\langle\boldsymbol{b},\boldsymbol{b}\rangle \tag{43}$$

即：

$$|\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle| \le \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\| \tag{44}$$

在 $\mathbb{R}^n$ 空间中，上述不等式等价于：

$$\left(\sum_{i=1}^{n} a_i b_i\right)^2 \le \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^2\right)\left(\sum_{i=1}^{n} b_i^2\right) \tag{45}$$

余弦定理

回忆丛书第一本书讲解的**余弦定理** (law of cosines):

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab\cos\theta \tag{46}$$

其中，a、b 和 c 为图 19 所示三角形的三边的边长。下面，我们用余弦定理来用余弦定理推导 (36)。

如图 19 所示，将三角形三个边视作向量，将三个向量长度代入 (46)，可以得到:

$$\|\boldsymbol{c}\|^2 = \|\boldsymbol{a}\|^2 + \|\boldsymbol{b}\|^2 - 2\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos\theta \tag{47}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 之差为向量 $\boldsymbol{c}$:

$$\boldsymbol{c} = \boldsymbol{a} - \boldsymbol{b} \tag{48}$$

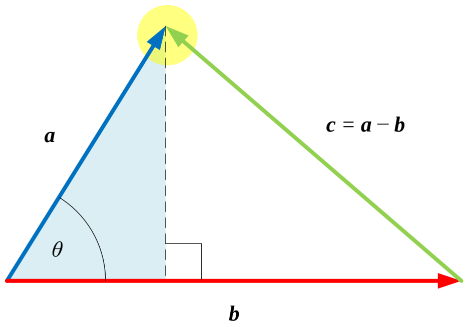


图 19. 余弦定理

(48) 等式左右分别和自身计算向量内积，得到如下等式:

$$\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c} = (\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}) \tag{49}$$

整理得到:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{c} &= (\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b})\cdot(\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}) = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b} - \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a} \\ &= \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b} - 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\end{aligned} \tag{50}$$

利用 (38)，(50) 可以写作:

$$\|\boldsymbol{c}\|^2 = \|\boldsymbol{a}\|^2 + \|\boldsymbol{b}\|^2 - 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} \tag{51}$$

比较 (47) 和 (51)，可以得到:

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\cos\theta \tag{52}$$

在概率统计、数据分析、机器学习等领域，向量内积无处不在。下面举几个例子。

在多维空间中，给定 A 和 B 坐标如下：

$$A(a_1, a_2, \ldots, a_n),\quad B(b_1, b_2, \ldots, b_n) \tag{53}$$

计算 A 和 B 两点的距离 AB：

$$\begin{aligned} AB &= \sqrt{(a_1 - b_1)^2 + (a_2 - b_2)^2 + \cdots + (a_n - b_n)^2} \\ &= \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (a_i - b_i)^2} \end{aligned} \tag{54}$$

用初始点位于原点的向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别代表 A 和 B 点，AB 距离就是 $\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}$ 的 L2 范数，也就是欧几里得距离：

$$AB = \|\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}\| = \sqrt{(\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}) \cdot (\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b})} = \sqrt{\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{b} - 2\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}} \tag{55}$$

回忆《概率统计》一册中介绍的样本方差公式，具体如下：

$$\operatorname{var}(X) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu)^2 \tag{56}$$

注意，对于总体方差，上式分母中 $n-1$ 改为 n。

令 $\boldsymbol{x}$ 为，

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{57}$$

(56) 可以写成：

$$\operatorname{var}(X) = \frac{(\boldsymbol{x} - \mu) \cdot (\boldsymbol{x} - \mu)}{n-1} \tag{58}$$

根据广播原则，$\boldsymbol{x} - \mu$ 相当于向量 $\boldsymbol{x}$ 的每一个元素分别减去 μ。

回忆总样本协方差公式：

$$\operatorname{cov}(X, Y) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu_X)(y_i - \mu_Y) \tag{59}$$

同样，对于总体协方差，上式分母中 $n-1$ 改为 n。

同样利用向量内积运算法则，上式可以写成：

$$\operatorname{cov}(X, Y) = \frac{(\boldsymbol{x} - \mu_X) \cdot (\boldsymbol{y} - \mu_Y)}{n} \tag{60}$$

本书第 22 章将从线性代数角度再和大家探讨概率统计相关内容。

2.6 向量夹角：反余弦

根据 (36)，可以得到向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角余弦值：

$$\cos\theta = \frac{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|} \tag{61}$$

通过反余弦，可以得到向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角：

$$\theta = \arccos\left(\frac{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|}\right) \tag{62}$$

arccos() 为反余弦函数，即从余弦值获得弧度。需要时可以进一步将弧度转化为角度。再次强调，(62) 代表向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 之间的"相对角度"。

图 16 中向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角弧度值和角度值可以通过 `Bk4_Ch2_09.py` 计算。

极坐标

下面，我们将向量放在极坐标中解释向量夹角余弦值。给定向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 坐标如下：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \tag{63}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 在极坐标中各自的角度为 θ_a 和 θ_b。角度 θ_a 和 θ_b 的正弦和余弦可以通过下式计算得到：

$$\begin{cases} \cos\theta_a = \dfrac{a_1}{\|\boldsymbol{a}\|}, & \sin\theta_a = \dfrac{a_2}{\|\boldsymbol{a}\|} \\ \cos\theta_b = \dfrac{b_1}{\|\boldsymbol{b}\|}, & \sin\theta_b = \dfrac{b_2}{\|\boldsymbol{b}\|} \end{cases} \tag{64}$$

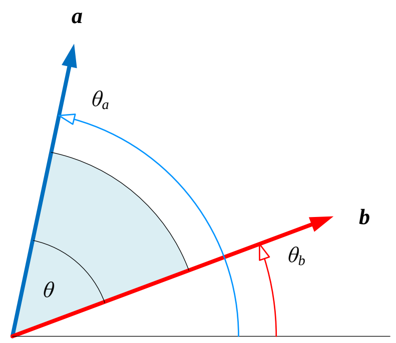


图 20. 极坐标中解释向量夹角

根据角的余弦和差恒等式，$\cos(\theta)$ 可以由 θ_a 和 θ_b 正、余弦构造：

$$\begin{aligned}\cos(\theta) &= \cos(\theta_b - \theta_a) = \cos(\theta_b)\cos(\theta_a) + \sin(\theta_b)\sin(\theta_a) \\ &= \frac{a_1}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_1}{\|\boldsymbol{b}\|} + \frac{a_2}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_2}{\|\boldsymbol{b}\|} = \frac{a_1 b_1 + a_2 b_2}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|}\end{aligned} \tag{65}$$

将 (64) 代入 (65) 得到：

$$\cos\theta = \frac{a_1}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_1}{\|\boldsymbol{b}\|} + \frac{a_2}{\|\boldsymbol{a}\|}\frac{b_2}{\|\boldsymbol{b}\|} = \frac{\overbrace{a_1 b_1 + a_2 b_2}^{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}}}{\|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|} \tag{66}$$

相信大家已经在上式分母中看到向量内积。

单位向量

本章前文介绍过某一向量方向上的单位向量这个概念，单位向量为我们提供了观察向量夹角余弦值的另外一个视角。

给定两个非 $\boldsymbol{0}$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$，我们首先计算它们各自方向上的单位向量：

$$\hat{\boldsymbol{a}} = \frac{\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|}, \quad \hat{\boldsymbol{b}} = \frac{\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{b}\|} \tag{67}$$

两个单位向量的内积就是夹角的余弦值：

$$\hat{\boldsymbol{a}} \cdot \hat{\boldsymbol{b}} = \frac{\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|} \cdot \frac{\boldsymbol{b}}{\|\boldsymbol{b}\|} = \cos\theta \tag{68}$$

正交单位向量

本章前文介绍的平面直角坐标系中 e_1 和 e_2 分别代表为沿着 x_1 和 x_2 单位向量。它们相互垂直，也就是是向量内积为 0：

$$\boldsymbol{e}_1 \cdot \boldsymbol{e}_2 = \langle \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2 \rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \tag{69}$$

也就是说，在一个平面上，单位向量 e_1、e_2 相互垂直，它俩可以构造标准直角坐标系，具体如图 21 (a) 所示。

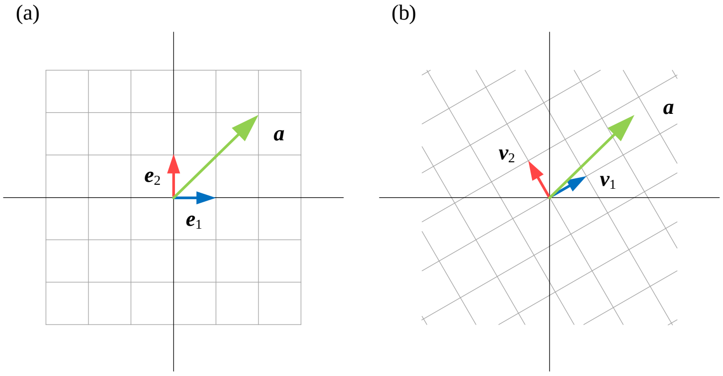


图 21. 向量 $\boldsymbol{a}$ 在三个不同的正交直角坐标系中位置

而平面上，成对正交单位向量有无数组，比如图 22 所示平面两组正交单位向量：

$$\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{bmatrix} = 0, \quad \boldsymbol{w}_1 \cdot \boldsymbol{w}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} = 0 \tag{70}$$

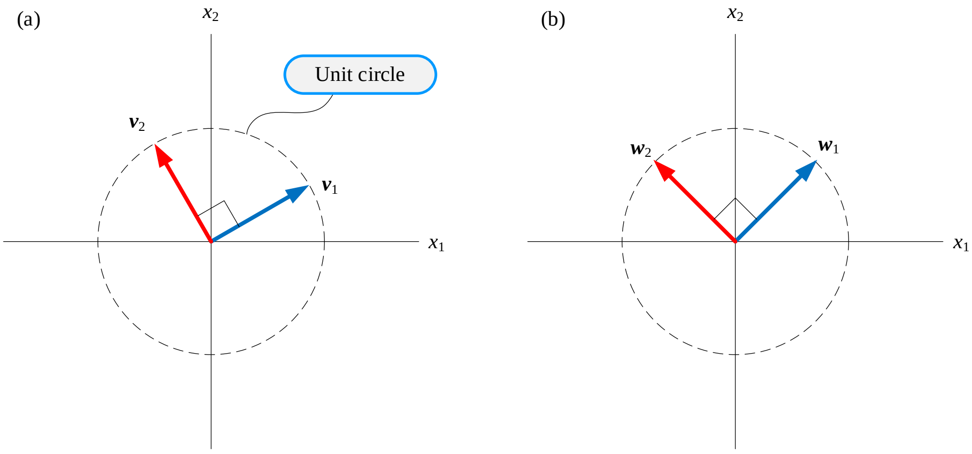


图 22. 两组正交单位向量

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 也可以构造如图 21 (b) 所示直角坐标系。类似地 $\boldsymbol{w}_1$、$\boldsymbol{w}_2$ 也可以构造如图 21 (c) 所示直角坐标系。也就是一个 $\mathbb{R}^2$ 平面上可以存在无数个直角坐标系。

如图 21 所示，同一个向量 $\boldsymbol{a}$ 在三个直角坐标系中有不同的坐标值。向量 $\boldsymbol{a}$ 在图 21 (a) 所示直角坐标系的坐标值很容易确定 (2, 2)。目前我们还没有掌握足够的数学工具来计算向量 $\boldsymbol{a}$ 在图 21 (b) 和 (c) 两个直角坐标系中的坐标值。这个问题要留到本书第 7 章来解决。

$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 都叫做 $\mathbb{R}^2$ 的规范正交基 (orthonormal basis)，而 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 有自己特别的名字——标准正交基 (standard basis)。而且大家很快就会发现 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 旋转一定角度可以得到$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$。本书第 7 章将深入介绍相关概念。

2.7 余弦相似度和余弦距离

机器学习中有一个重要的概念，叫做**余弦相似度** (cosine similarity)。余弦相似度用向量夹角的余弦值度量样本数据的相似性。

用 $k(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q})$ 来表达 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两个列向量的余弦相似度，定义如下：

$$k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} \tag{71}$$

上一节我们介绍过，如果两个向量方向相同，则夹角 θ 余弦值 $\cos(\theta) = 1$；如果，两个向量方向完全相反，夹角 θ 余弦值 $\cos(\theta) = -1$。

因此，余弦相似度取值范围在 [−1, +1] 之间。另外，大家是否在余弦相似度中看到相关性系数的影子？

下面再介绍**余弦距离** (cosine distance)。余弦距离定义基于余弦相似度。用 $d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q})$ 来表达 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两个列向量的余弦距离，具体定义如下：

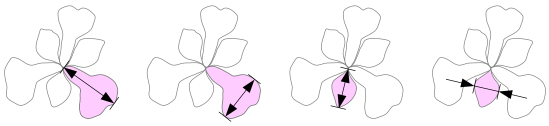
$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} \tag{72}$$

本章前文介绍的欧几里得距离，即 L^2 范数，是一种最常见的距离度量。本节介绍的余弦距离也是一种常见的距离度量。

本系列丛书将在《概率统计》、《机器学习》逐步介绍常见距离度量，“距离”的内涵会不断丰富。

鸢尾花例子

图 23 给出鸢尾花四个样本数据。$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 两个样本对应的鸢尾花都是 setosa 这一亚属。$\boldsymbol{x}^{(51)}$ 样本对应的鸢尾花为 versicolor 这一亚属；$\boldsymbol{x}^{(101)}$ 样本对应的鸢尾花为 virginica 这一亚属。



	Sepal length	Sepal width	Petal length	Petal width	
$\boldsymbol{x}^{(1)}$, 1	5.1	3.5	1.4	0.2	setosa
$\boldsymbol{x}^{(2)}$, 2	4.9	3	1.4	0.2	setosa
$\boldsymbol{x}^{(51)}$, 51	7	3.2	4.7	1.4	versicolor
$\boldsymbol{x}^{(101)}$, 101	6.3	3.3	6	2.5	virginica

图 23. 鸢尾花的四个样本数据

计算 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 两个向量余弦距离：

$$\begin{aligned} & d\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)}\right)=1-k\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(2)}\right) \\ & =1-\frac{5.1\times 4.9+3.5\times 3\ +\ 1.4\times 1.4\ +\ 0.2\times 0.2}{\sqrt{5.1^2+3.5^2\ +\ 1.4^2\ +\ 0.2^2}\times\sqrt{4.9^2+3^2\ +\ 1.4^2\ +\ 0.2^2}} \\ & =1-\frac{37.49}{6.34507\times 5.9169} \\ & =1-0.99857=0.00142 \end{aligned} \tag{73}$$

同理，可以计算得到 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(51)}$，$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(101)}$ 两各余弦距离：

$$\begin{aligned} & d\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(51)}\right)=0.07161 \\ & d\left(\boldsymbol{x}^{(1)},\boldsymbol{x}^{(101)}\right)=0.13991 \end{aligned} \tag{74}$$

可以发现，$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(2)}$ 两朵同属于 setosa 亚属的鸢尾花，余弦距离较近，也就是较为相似。

$\boldsymbol{x}^{(1)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(101)}$ 分别属于 setota 和 virginica 亚属，余弦距离较远，也就是极为不似。

给大家留个思考题，鸢尾花数据有 150 个数据点，成对余弦相似度有 11175 个，大家想想该怎么便捷计算、存储这些数据呢？

`Bk4_Ch2_10.py` 可以完成上述计算。感兴趣的读者可以修改代码计算 $\boldsymbol{x}^{(51)}$ 和 $\boldsymbol{x}^{(101)}$ 的余弦距离，并结合样本标签分析结果。

2.8 向量积：结果为向量

向量积 (vector product) 也叫**叉乘** (cross product) 或外积，向量积结果为向量。

$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 向量积，记做 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$。$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 作为一个向量，我们需要了解它的方向和大小两个成分。

方向

如图 24 所示，$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 方向分别垂直于向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$，即 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 垂直于向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 构成平面。

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 以及 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 三者关系可以用右手法则判断，如图 25 所示。图 25 这幅图中，我们可以看到 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{b} \times \boldsymbol{a}$ 方向相反。

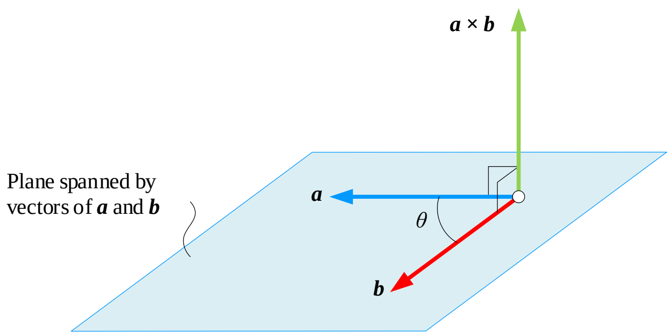


图 24. $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 垂直于向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 构成平面

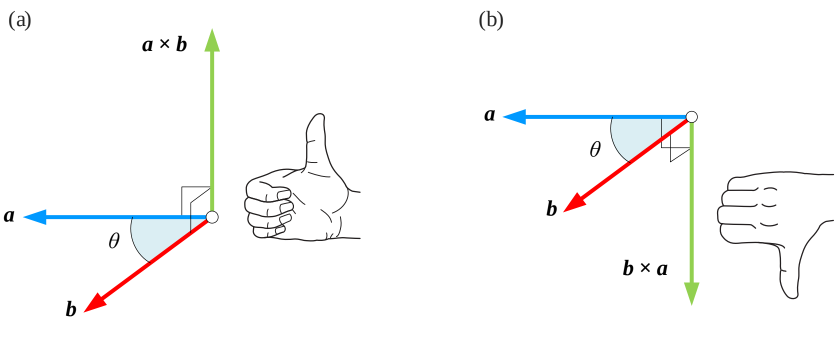


图 25. 向量叉乘右手定则

大小

$\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 模，也就是 $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 向量积大小，通过下式获得：

$$\|\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}\| = \|\boldsymbol{a}\|\|\boldsymbol{b}\|\sin(\theta) \tag{75}$$

其中 θ 为向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角。如图 26 所示，从几何角度，向量积的模 $\|\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\|$ 相当于图中平行四边形的面积。

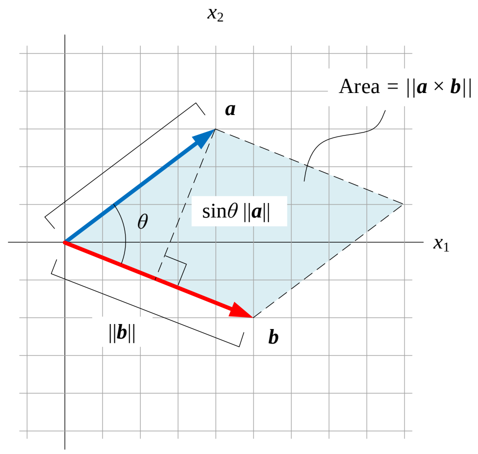


图 26. $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 向量积的几何含义

如图 27 所示，从数据结构角度，形状相同的两个列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 叉乘得到的向量积 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 形状不变。

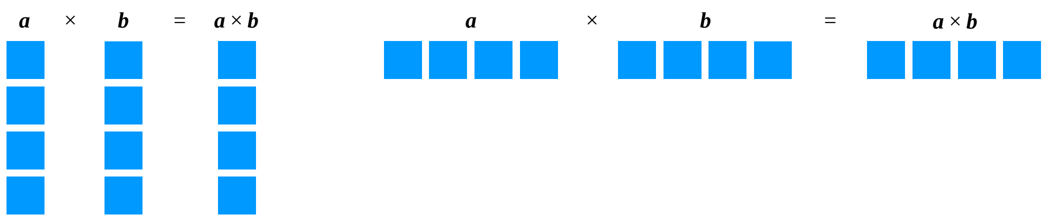


图 27. 数据结构角度看向量内积运算

正交向量之间的叉乘

如图 28 (a) 所示，空间直角坐标系中三个正交向量 $\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$) (x_1 轴正方向)、$\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$) (x_2 轴正方向) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) (x_3 轴正方向) 之间满足向量叉乘关系，如下：

$$\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{j}=\boldsymbol{k},\quad \boldsymbol{j}\times\boldsymbol{k}=\boldsymbol{i},\quad \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{i}=\boldsymbol{j} \tag{76}$$

图 28 (b) 展示以上三个等式中 $\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 前后顺序关系。若调换 (76) 叉乘元素顺序，结果反向，对应以下三个运算式：

$$\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{i}=-\boldsymbol{k},\quad \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{j}=-\boldsymbol{i},\quad \boldsymbol{i}\times\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{j} \tag{77}$$

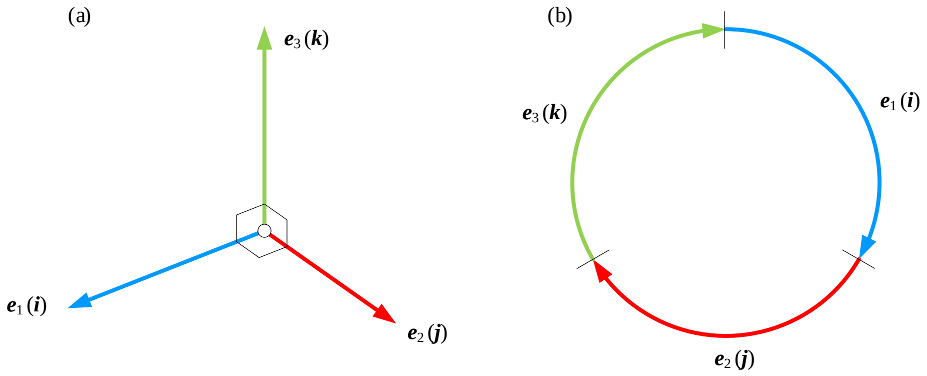


图 28. 三维空间正交单位向量基底之间关系

特别的，向量与自身叉乘等于 $\boldsymbol{0}$ 向量，如下：

$$\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{i}=\boldsymbol{0},\quad \boldsymbol{j}\times\boldsymbol{j}=\boldsymbol{0},\quad \boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0} \tag{78}$$

任意两个向量的叉乘

用基底向量 $\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 表达向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}&=a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}\\ \boldsymbol{b}&=b_1\boldsymbol{i}+b_2\boldsymbol{j}+b_3\boldsymbol{k}\end{aligned} \tag{79}$$

整理向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 叉乘，如下：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}&=\left(a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}\right)\times\left(b_1\boldsymbol{i}+b_2\boldsymbol{j}+b_3\boldsymbol{k}\right)\\ &=a_1b_1\left(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{i}\right)+a_1b_2\left(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{j}\right)+a_1b_3\left(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{k}\right)\\ &\quad+a_2b_1\left(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{i}\right)+a_2b_2\left(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{j}\right)+a_2b_3\left(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{k}\right)\\ &\quad+a_3b_1\left(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{i}\right)+a_3b_2\left(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{j}\right)+a_3b_3\left(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}\right)\\ &=\left(a_2b_3-a_3b_2\right)\boldsymbol{i}+\left(a_3b_1-a_1b_3\right)\boldsymbol{j}+\left(a_1b_2-a_2b_1\right)\boldsymbol{k}\end{aligned} \tag{80}$$

$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 叉乘还可以通过行列式求解，我们将在本书第 4 章讲解。

下列为叉乘运算常见性质：

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}\\ &\boldsymbol{a}\times\left(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c}\right)=\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{c}\\ &\left(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}\right)\times\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{c}\\ &\boldsymbol{a}\times\left(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}\right)\neq\left(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\right)\times\boldsymbol{c}\\ &k\left(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\right)=k\left(\boldsymbol{a}\right)\times\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}\times\left(k\boldsymbol{b}\right)\\ &\boldsymbol{a}\cdot\left(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c}\right)=\left(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\right)\cdot\boldsymbol{c}\end{aligned} \tag{81}$$

举个例子

下面结合代码计算 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个向量叉乘：

$$\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}-2\\1\\1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\-2\\-1\end{bmatrix} \tag{82}$$

即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a}&=-2\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j}+\boldsymbol{k}\\\boldsymbol{b}&=\boldsymbol{i}-2\boldsymbol{j}-\boldsymbol{k}\end{aligned} \tag{83}$$

$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 结果如下：

$$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\-1\\3\end{bmatrix} \tag{84}$$

即

$$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}=\boldsymbol{i}-\boldsymbol{j}+3\boldsymbol{k} \tag{85}$$

numpy.cross() 函数可以用来计算列向量和行向量的向量积。Bk4_Ch2_11.py 计算上例。

2.9 逐项积：对应元素分别相乘

元素乘积 (element-wise multiplication)，也称为**阿达玛乘积** (Hadamard product) 或**逐项积** (piecewise product)。逐项积指的是两个形状相同的矩阵，对应元素相乘得到同样形状的矩阵。向量是一种特殊矩阵，阿达玛乘积也适用于向量。图 29 给出的是从数据角度看向量逐项积运算。

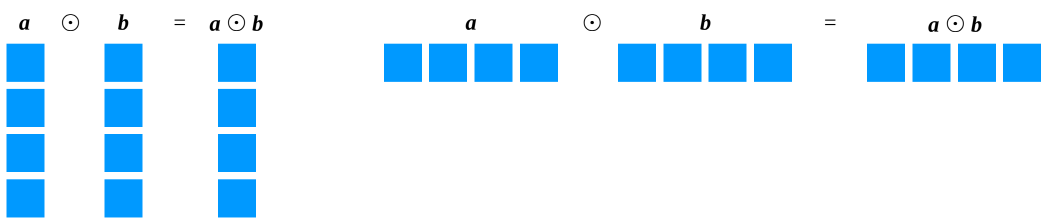


图 29. 向量逐项积运算

给定如下 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 两个列向量:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{86}$$

列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的逐项积定义如下:

$$\boldsymbol{a} \odot \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_2 b_2 & \cdots & a_n b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{87}$$

给定如 (82) 两个列向量，它们的逐项积为:

$$\boldsymbol{a} \odot \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \odot \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{88}$$

Bk4_Ch2_12.py 计算行向量逐项积。

2.10 向量张量积：张起网格面

张量积 (tensor product) 又叫**外积** (outer product)，两个列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 定义如下:

$$\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}_{n\times 1} \otimes \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}_{m\times 1} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & \cdots & a_1 b_m \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & \cdots & a_2 b_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n b_1 & a_n b_2 & \cdots & a_n b_m \end{bmatrix}_{n\times m} \tag{89}$$

图 30 (a) 给出上述运算的示意图。

⚠ 注意，上式中 $\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 为向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 的乘法运算，它遵循矩阵乘法规则。本书第 4、5、6 三章要从不同角度讲解矩阵乘法。

观察 (89)，发现 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 可以写成两种形式:

$$\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} a_1 \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \\ a_2 \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ a_n \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}_{n\times 1} = \begin{bmatrix} b_1 \boldsymbol{a} & b_2 \boldsymbol{a} & \cdots & b_1 \boldsymbol{a} \end{bmatrix} \tag{90}$$

第一种形式相当于，$\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 先按不同比例 (a_i) 缩放得到 $a_i\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$，再上下叠加。

第二种形式相当于，$\boldsymbol{a}$ 先按不同比例 (b_j) 缩放得到 $b_j\boldsymbol{a}$，再左右排列。

向量 $\boldsymbol{a}$ 和其自身张量积 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}$ 结果为方阵：

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times 1}\otimes\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times 1}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1a_1 & a_1a_2 & \cdots & a_1a_n\\a_2a_1 & a_2a_2 & \cdots & a_2a_n\\\vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\a_na_1 & a_na_2 & \cdots & a_na_n\end{bmatrix}\tag{91}$$

图 30 (b) 给出上述运算的示意图。

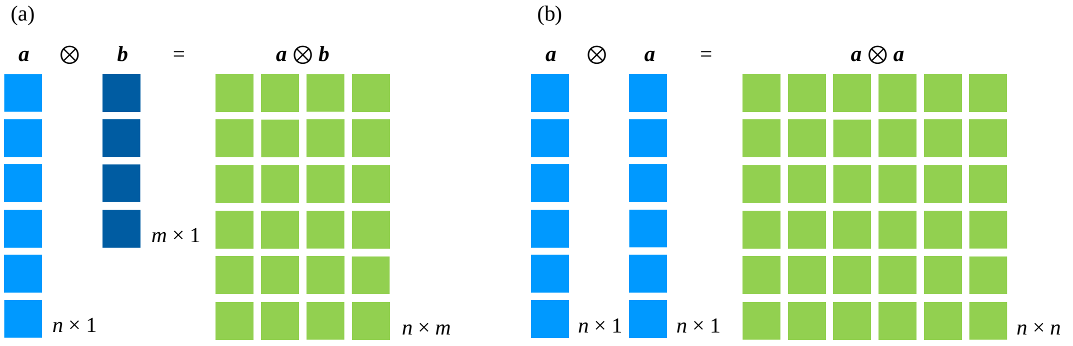


图 30. 向量张量积

请大家注意张量积一些常见性质：

$$\begin{aligned}&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}\\&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{a}\\&(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{v}+\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{v}\\&\boldsymbol{v}\otimes(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})=\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{a}+\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{b}\\&t(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})=(t\boldsymbol{a})\otimes\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}\otimes(t\boldsymbol{b})\\&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}\otimes(\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{v})\end{aligned}\tag{92}$$

几何视角

图 31 所示为从几何图像角度解释向量的张量积。向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 相当于两个维度上的支撑框架，两者的张量积则“张起”一个网格面数据 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$。

当我们关注 $\boldsymbol{b}$ 方向时，网格面沿同一方向的每一条曲线都类似 $\boldsymbol{b}$，唯一的差别是高度上存在一定比例的缩放，这个比值就是 a_i。a_i 是向量 $\boldsymbol{a}$ 中的一个元素。

同理，观察 $\boldsymbol{a}$ 方向的网格面，每一条曲线都类似 $\boldsymbol{a}$。向量 $\boldsymbol{b}$ 的某一元素 b_j 提供曲线高度的缩放系数。

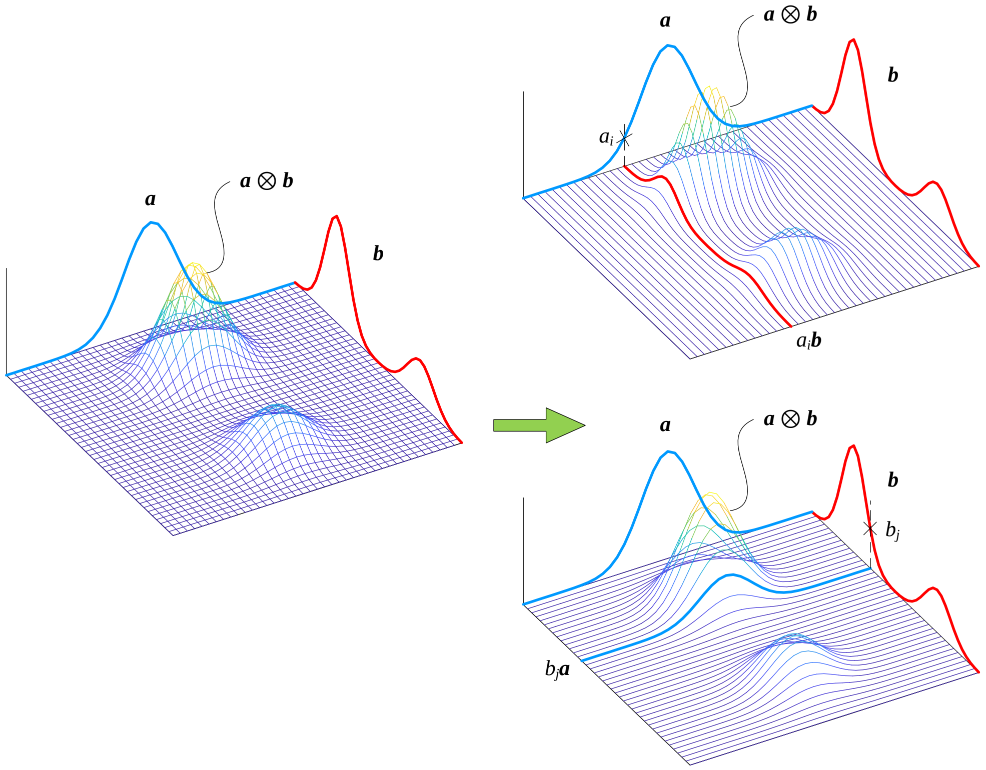


图 31. 从几何角度解释向量张量积

数据视角

下面再从数据角度可视化张量积运算。给定列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别为：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} 0.5 & -0.7 & 1 & 0.25 & -0.6 & -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} -0.8 & 0.5 & -0.6 & 0.9 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{93}$$

图 32 所示为张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 结果热图，形状为 5×4。

如图 33 所示，$\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 的每一列都和 $\boldsymbol{a}$“相似”，也就是说它们之间呈现倍数关系。

类似地，如图 34 所示，$\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 等价于 $\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$，因此 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 每一行都和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$“相似”，也呈现倍数关系。

本书第 7 章会聊到向量的秩 (rank)，大家就会知道 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 的秩为 1，就是因为行、列这种“相似”。

图 35 所示为张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{a}$ 结果热图，形状为 5×5 方阵。

图 36 所示为张量积 $\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{b}$ 结果热图，形状为 4×4 对称方阵。显然，$\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{b}$ 都是对称矩阵。

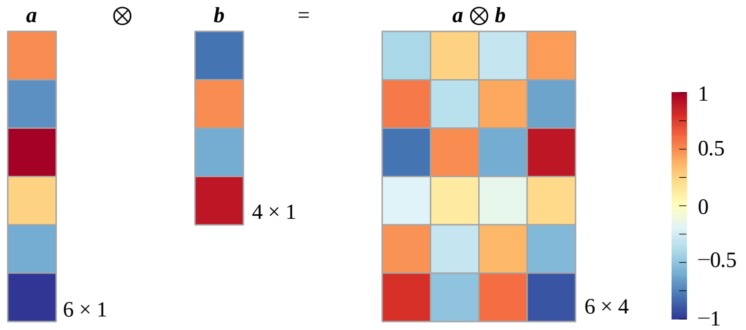


图 32.张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$

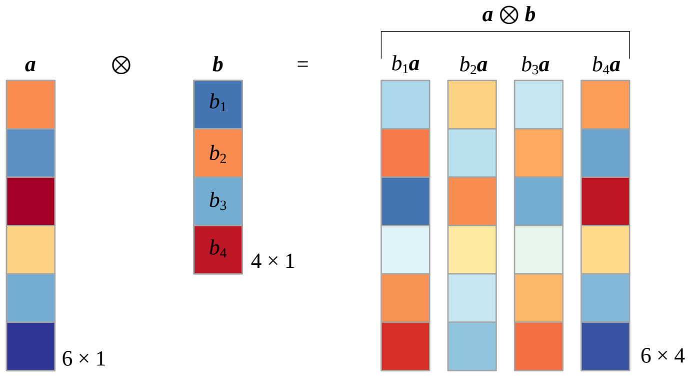


图 33. $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 的每一列都和 $\boldsymbol{a}$“相似”

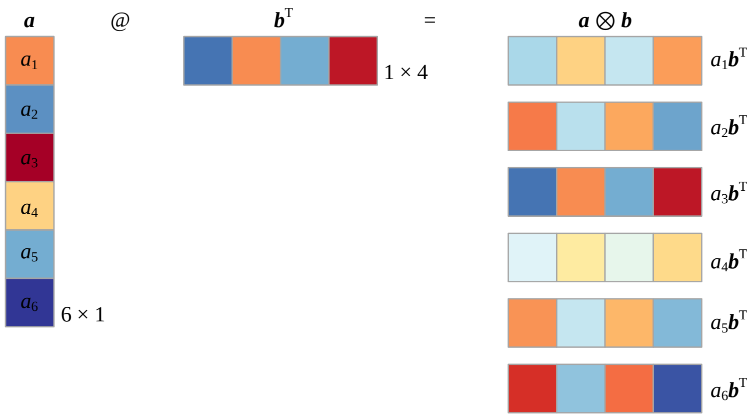


图 34. $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 的每一行都和 $\boldsymbol{b}$“相似”

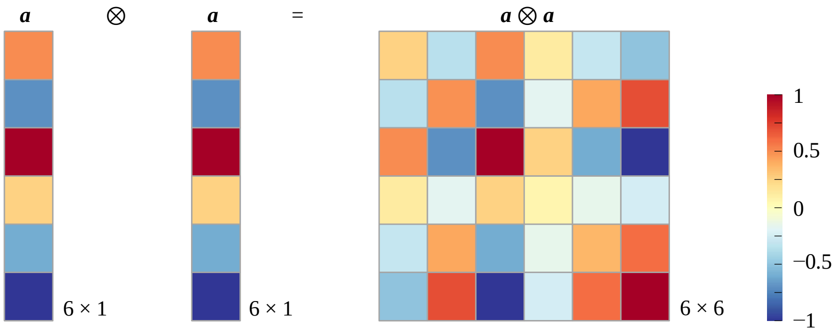


图 35. 向量张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{a}$

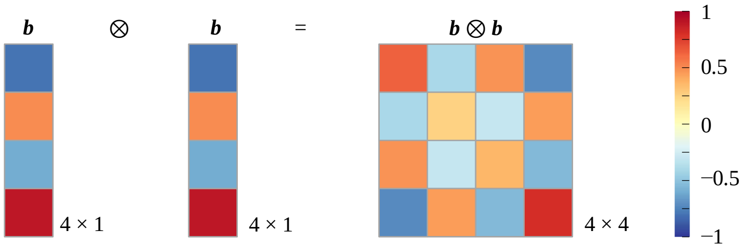


图 36. 向量张量积 $\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{b}$

Bk4_Ch2_13.py 绘制图 32、图 35 和图 36。

《概率统计》将介绍，如果两个离散随机变量 X 和 Y 独立，联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 等于 $p_X(x)$ 和 $p_Y(y)$ 这两个边缘概率质量函数 PMF 乘积：

$$\underbrace{p_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \tag{94}$$

如图 37 所示，$p_X(x)$ 和 $p_Y(y)$ 可以分别用火柴梗图可视化，而 $p_{X,Y}(x,y)$ 用二维火柴梗图展示。

从线性代数角度，当 x 和 y 分别取不同值时，$p_X(x)$ 和 $p_Y(y)$ 相当于两个向量。

而 x 和 y 分别取不同值时，$p_{X,Y}(x,y)$ 相当于是矩阵。

X 和 Y 独立时，$p_{X,Y}(x,y)$ 值的矩阵就是 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 两个向量的张量积。

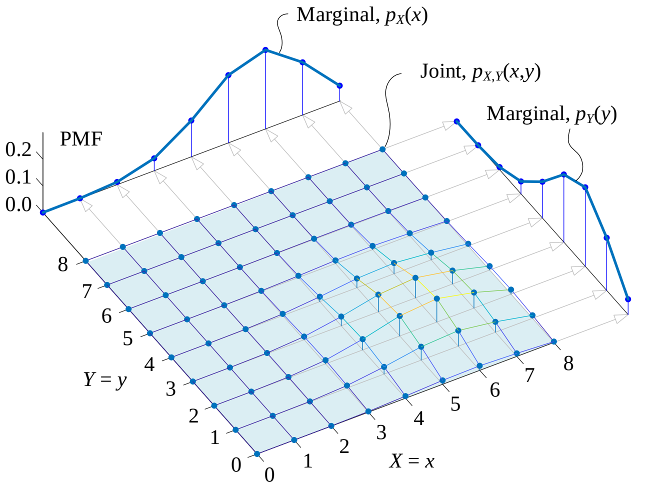


图 37. 离散随机变量独立条件下，联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 等于 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 乘积

本章聊了聊常见的几种向量运算。学完本章，希望大家看到任何向量和向量运算，可以试着从几何、数据两个角度来思考问题。

从几何角度，向量是既有长度又有方向的量。从数据角度，表格数据就是矩阵。而矩阵的每一行向量是一个样本点，每一列向量代表一个特征。

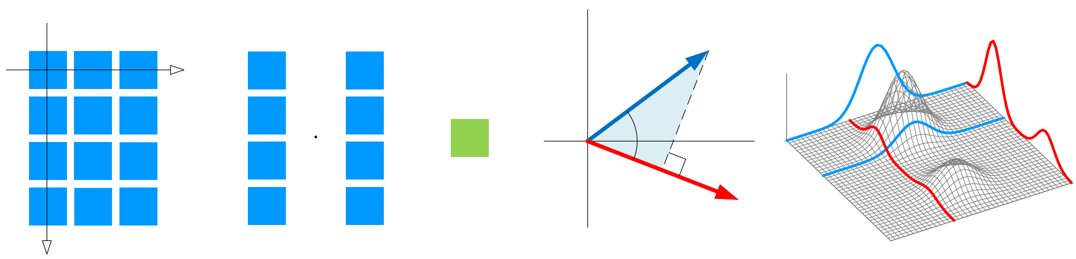


图 38. 总结本章重要内容的四副图

向量有两个元素——长度和方向。向量的长度就是向量的模，向量之间的相对角度可以用向量内积来求解。

提到向量模、L^2 范数、欧几里得距离，希望大家能够联想到正圆、正圆球。本书第 3 章还要介绍更多范数以及它们对应的几何图像。

向量内积的结果是个标量，请大家格外注意向量内积和矩阵乘法联系，以及和 Σ 求和运算之间的关系。

从几何视角看向量内积特别重要，请大家格外关注向量夹角余弦值、余弦定理、余弦相似度、余弦距离，以及本书后续要讲的标量投影、向量投影、协方差、相关性系数等数学概念之间的关系。

向量的外积结果还是个向量，这个向量垂直于原来两个向量构成的平面。

几何视角下，张量积像是张起一个网格面。张量积在机器学习和数据科学算法中应用特别广泛，有关这个运算的性质我们会慢慢展开讲解。