1 Vector and More 不止向量

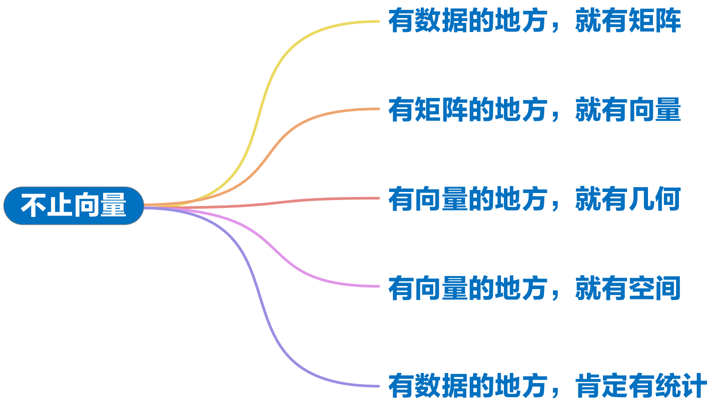
一个有关向量的故事，从鸢尾花数据讲起

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


不止向量
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

1.1 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。

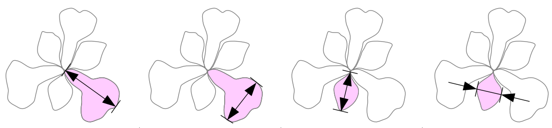
简单来说，矩阵是由若干行或若干列元素排列得到的**数组** (array)。矩阵内的元素可以是实数、虚数、符号，甚至是代数式。

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

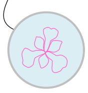


图 1. 鸢尾花数据，数值数据单位为厘米 (cm)

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。

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)。

⚠ 注意，本书用大写、粗体、斜体字母代表矩阵，比如 $\boldsymbol{X}$、$\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{\Sigma}$、$\boldsymbol{\Lambda}$。特别地，本书用 $\boldsymbol{X}$ 代表样本数据矩阵，用 $\boldsymbol{\Sigma}$ 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 $\boldsymbol{x}$、$\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{v}$。

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

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，$\boldsymbol{X}$ 任一行向量 ($\boldsymbol{x}^{(1)}$、$\boldsymbol{x}^{(2)}$、…、$\boldsymbol{x}^{(150)}$) 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 $\boldsymbol{X}$ 某一列向量 ($\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、$\boldsymbol{x}_3$、$\boldsymbol{x}_4$) 为鸢尾花某个特征的样本数据。

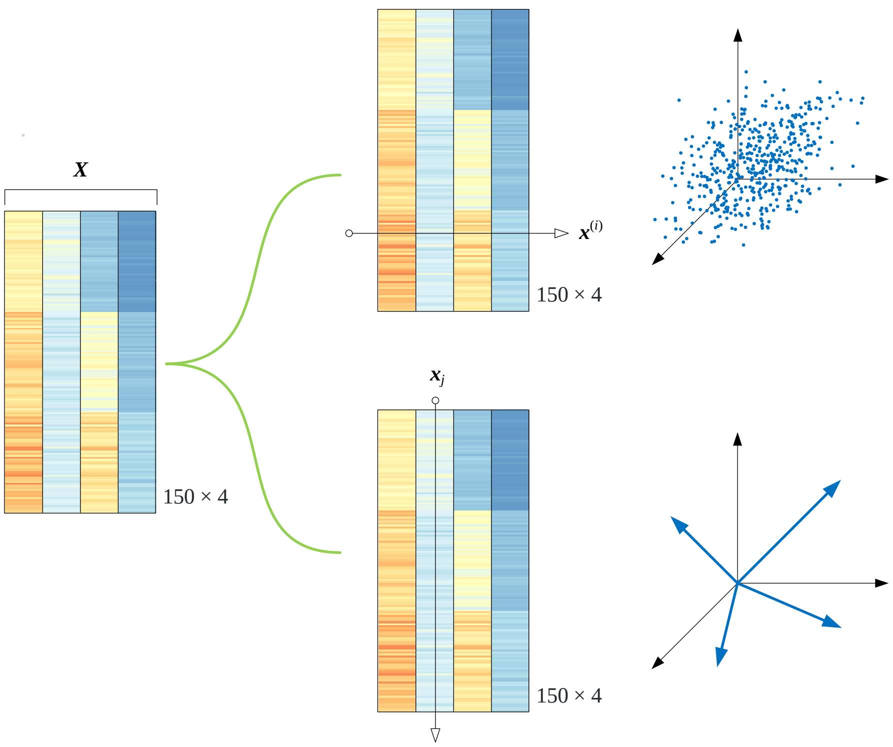


图 2. 矩阵可以分割成一系列行向量或列向量

图片

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。

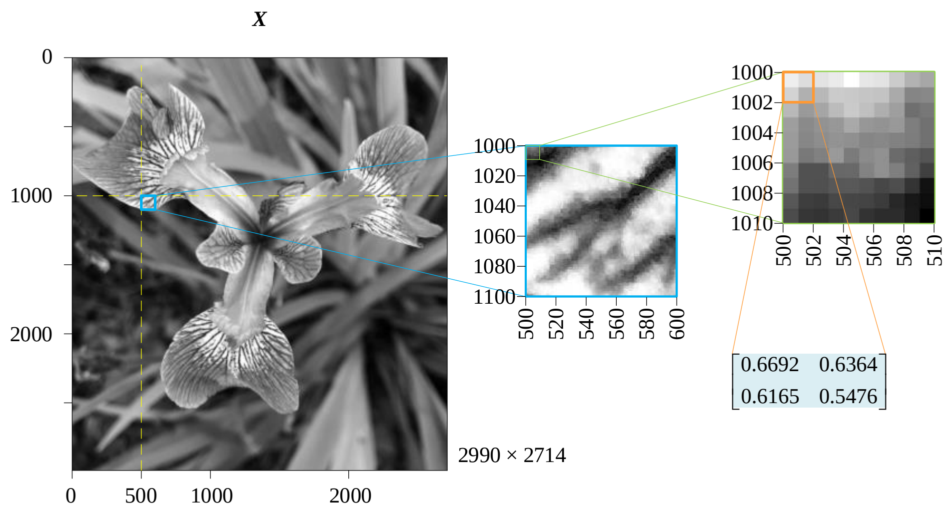


图 3. 照片也是数据矩阵

1.2 有矩阵的地方，就有向量

行向量

首先，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 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 $\boldsymbol{X}$ 的第 i 行可以写成行向量 $\boldsymbol{x}^{(i)}$。上标圆括号中的 i 代表序号，对于鸢尾花数据集，$i = 1 \sim 150$。

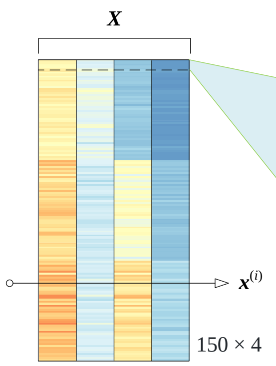
举个例子，$\boldsymbol{X}$ 的第 1 行行向量记做 $\boldsymbol{x}^{(1)}$，具体为：

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

行向量 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 代表鸢尾花数据集编号为 1 的样本。行向量 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 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 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ 也可以视作 1 行、4 列的矩阵，即形状为 1×4。

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)。



Sepal length	Sepal width	Petal length	Petal width	
5.1	3.5	1.4	0.2	$\boldsymbol{x}^{(1)}$
4.9	3	1.4	0.2	$\boldsymbol{x}^{(2)}$
4.7	3.2	1.3	0.2	$\boldsymbol{x}^{(3)}$
4.6	3.1	1.5	0.2	$\boldsymbol{x}^{(4)}$
5	3.6	1.4	0.2	$\boldsymbol{x}^{(5)}$

图 4. 鸢尾花数据，行向量代表样本数据点

列向量

矩阵 $\boldsymbol{X}$ 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 $\boldsymbol{X}$ 的第 j 列可以写成列向量 $\boldsymbol{x}_j$。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，$j = 1 \sim 4$。

比如，$\boldsymbol{X}$ 的第 1 列向量记做 $\boldsymbol{x}_1$，具体为：

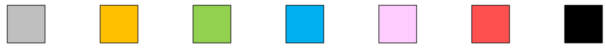
$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{bmatrix} 5.1 \\ 4.9 \\ \vdots \\ 5.9 \end{bmatrix}_{150\times 1} \tag{2}$$

列向量 $\boldsymbol{x}_1$ 代表鸢尾花 150 个样本数据花萼长度数值。列向量 $\boldsymbol{x}_1$ 可以视作 150 行、1 列的矩阵，即形状为 150×1。整个数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写成四个列向量，即 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \boldsymbol{x}_4]$。

⚠ 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 $\boldsymbol{x}^{(1)}$。而列向量编号采用下标，比如 $\boldsymbol{x}_1$。

大家可能会问，元素数量均为 150 的 $\boldsymbol{x}_1$、$\boldsymbol{x}_2$、$\boldsymbol{x}_3$、$\boldsymbol{x}_4$ 这四个向量到底意味着什么？有没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。

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。



$$\begin{bmatrix}0.8\\0.8\\0.8\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}1\\0.8\\0\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}0.6\\0.8\\0.3\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}0\\0.7\\0.9\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}1\\0.8\\1\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}1\\0.3\\0.3\end{bmatrix}\quad\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix}$$

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”。

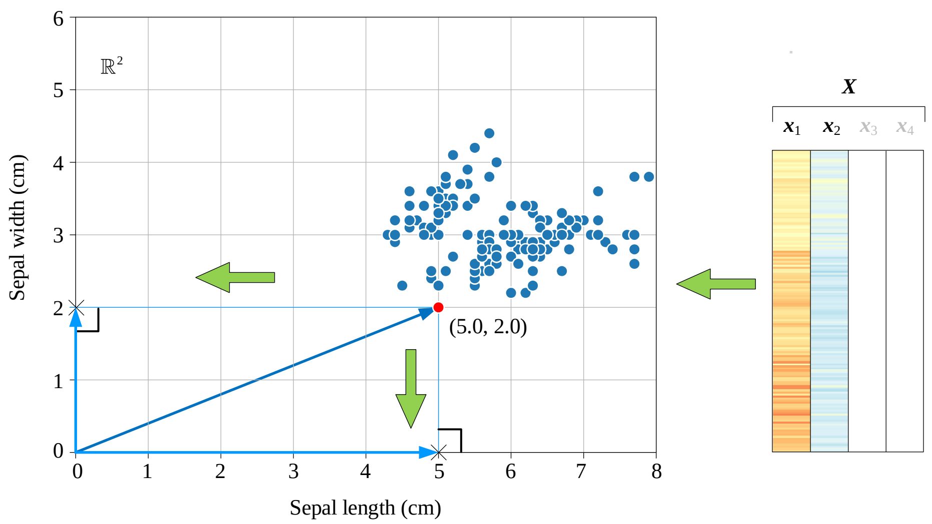


图 6. 鸢尾花前两个特征数据散点图

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。

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 × 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 $\mathbb{R}$。

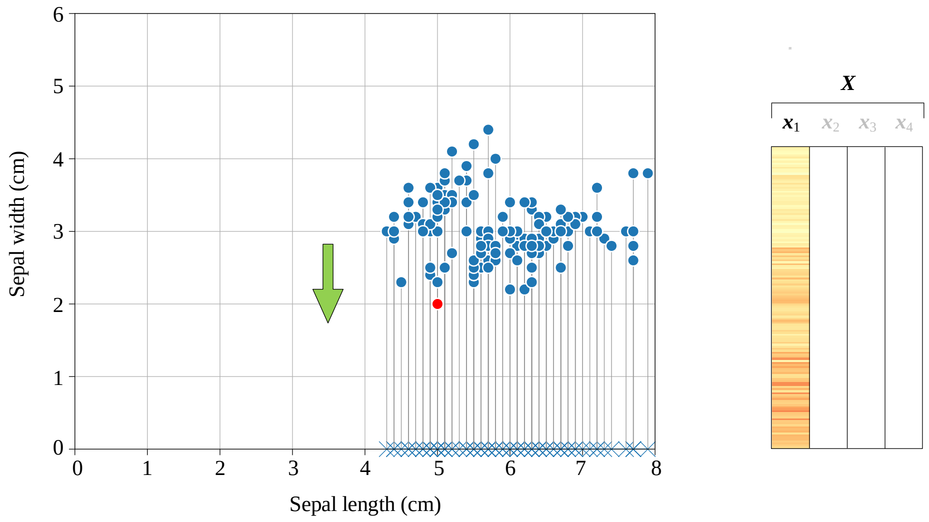


图 7. 二维散点正交投影到横轴

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。

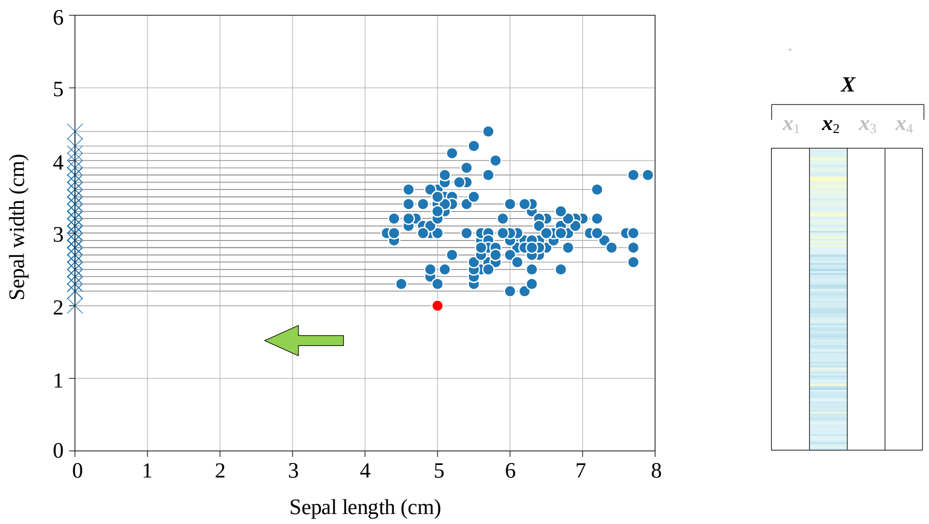


图 8. 二维散点正交投影到纵轴

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°。观察图 9，我们已经发现投影点似乎是 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 的某种组合。也就是说，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 分别贡献 $v_1\boldsymbol{x}_1$ 和 $v_2\boldsymbol{x}_2$，两种成分合成 $v_1\boldsymbol{x}_1 + v_2\boldsymbol{x}_2$ 就是投影点坐标。$v_1\boldsymbol{x}_1 + v_2\boldsymbol{x}_2$ 也叫**线性组合** (linear combination)。

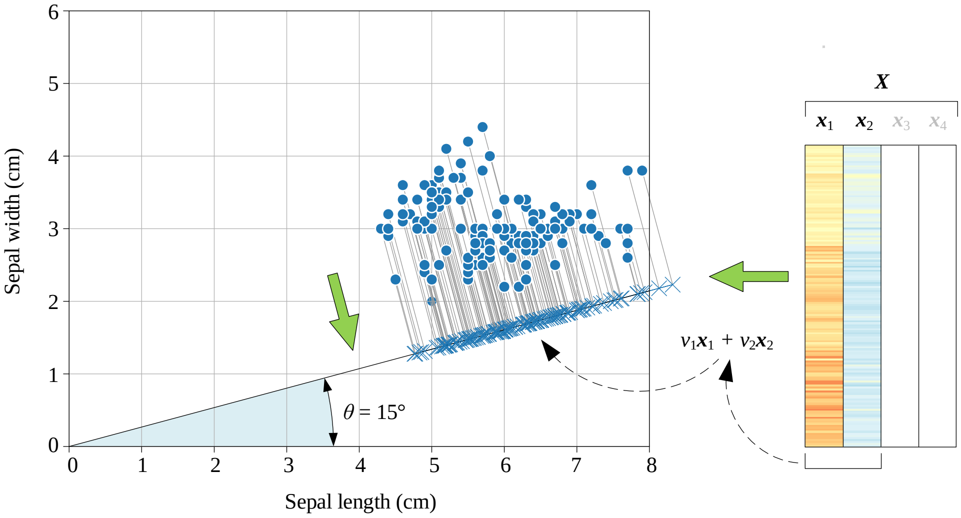


图 9. 二维散点正交投影到一条斜线

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。

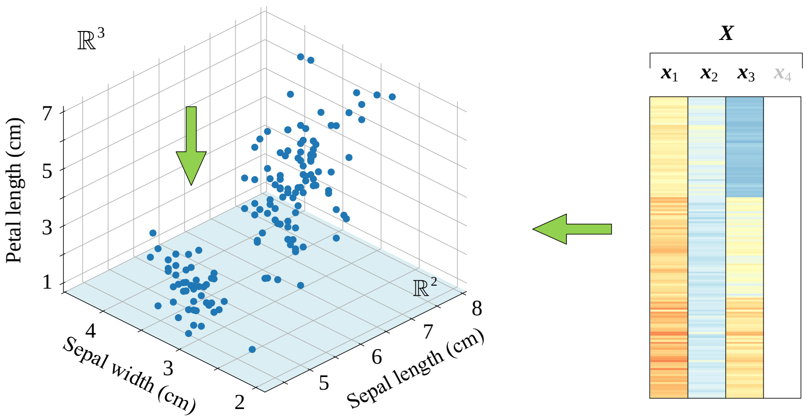


图 10. 鸢尾花前三个特征数据散点图

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。

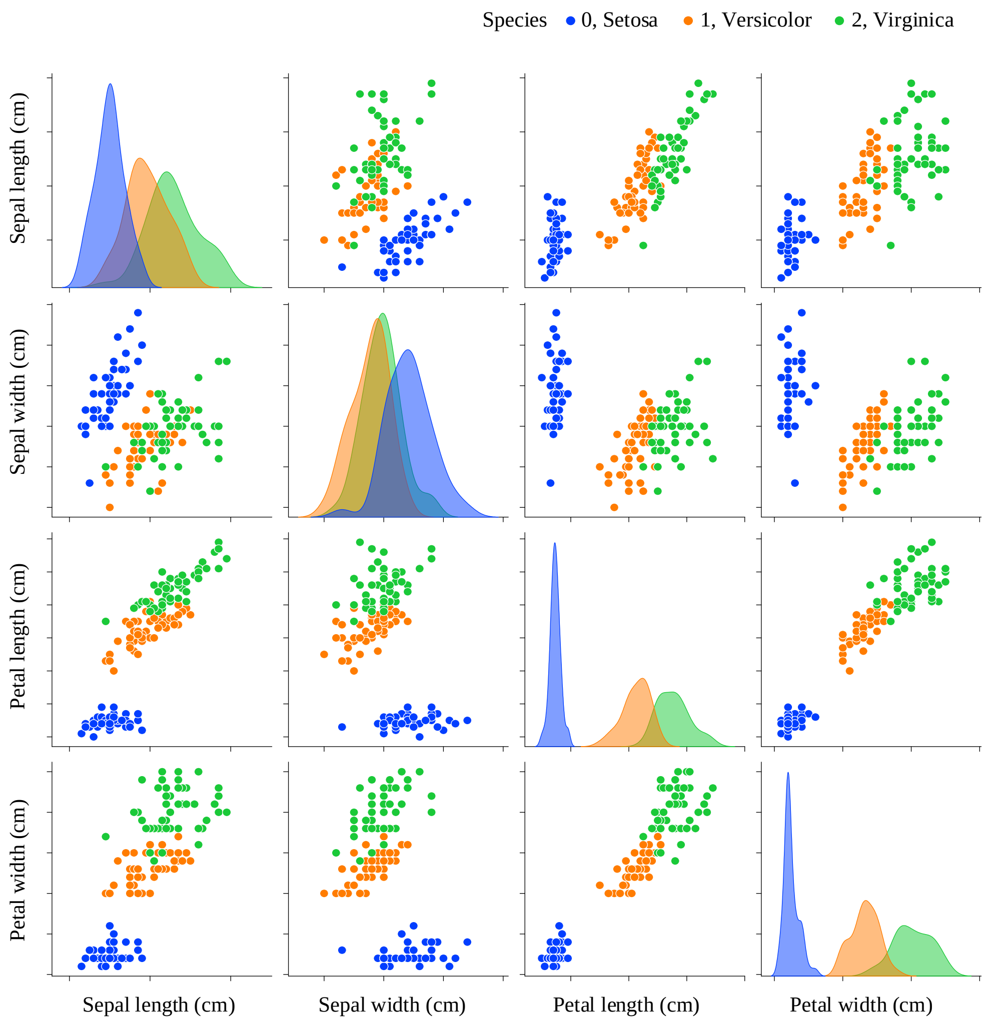


图 11. 鸢尾花数据成对特征散点图，考虑分类标签，图片来自《数学要素》

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 $\boldsymbol{0}$。而平面 $\mathbb{R}^2$ 这个二维空间则“装下”了这 150 个行向量。

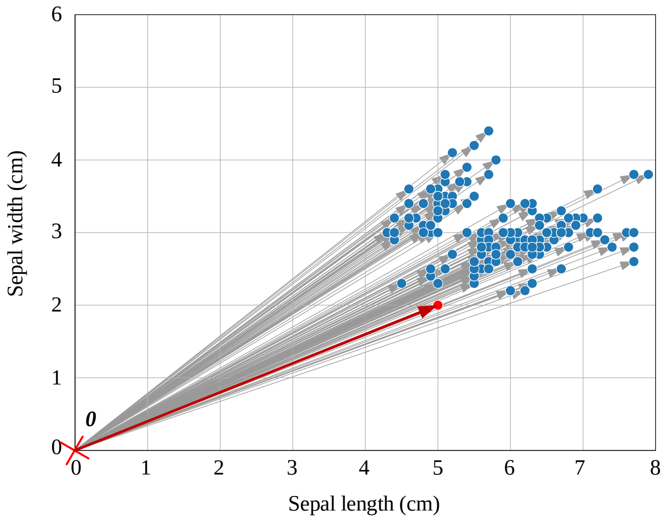


图 12. 向量起点为原点

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。

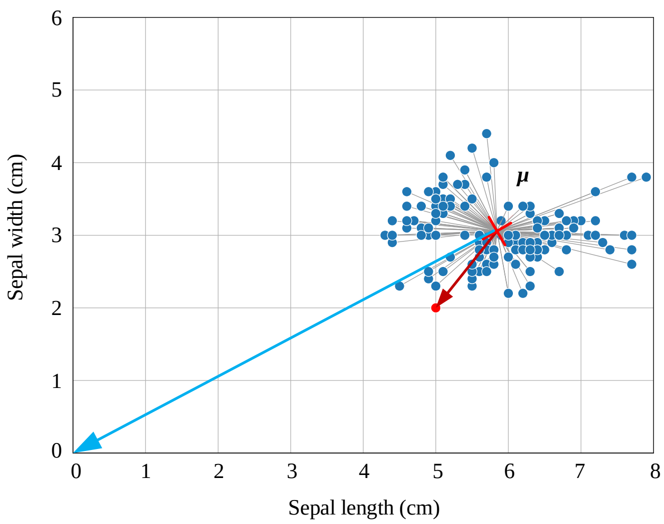


图 13. 向量起点为质心

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 $\boldsymbol{X}$ 去均值化得到的数据矩阵记做 $\boldsymbol{X}_c$，显然 $\boldsymbol{X}_c$ 的质心位于原点 $\boldsymbol{0}$。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。

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。

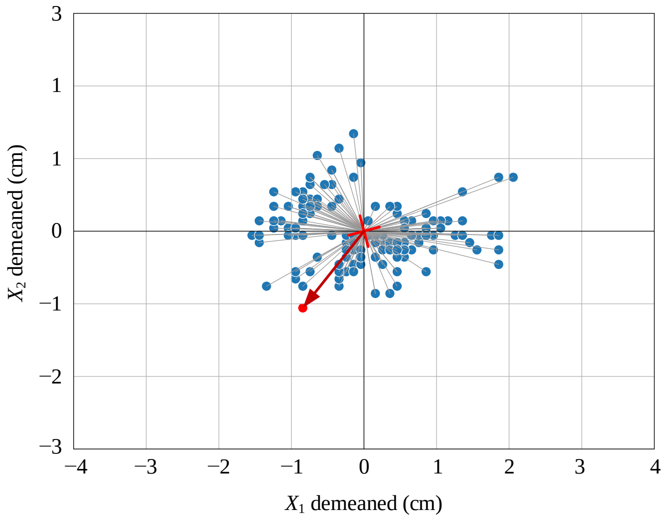


图 14. 数据去均值化

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 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 中矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 扮演的角色就是完成 $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 线性映射。列向量 $\boldsymbol{x}_{n\times 1}$ 在 $\mathbb{R}^n$ 中，列向量 $\boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 在 $\mathbb{R}^m$ 中。

$\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 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：

$$\begin{cases} 1\cdot x_1 + 1\cdot x_2 = 35 \\ 2\cdot x_1 + 4\cdot x_2 = 94 \end{cases} \Rightarrow \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}}_{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 35 \\ 94 \end{bmatrix}}_{b} \tag{3}$$

即：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{4}$$

未知变量构成的列向量 $\boldsymbol{x}$ 可以利用下式求解：

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

(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 $\boldsymbol{A}$ 完成的是**线性变换** (linear transformation)。如图 15 所示，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 把 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 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：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_{e_1} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}}_{a_1}, \quad \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}}_{e_2} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}}_{a_2} \tag{6}$$

而上式结果恰好是矩阵 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 的两个列向量 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$。

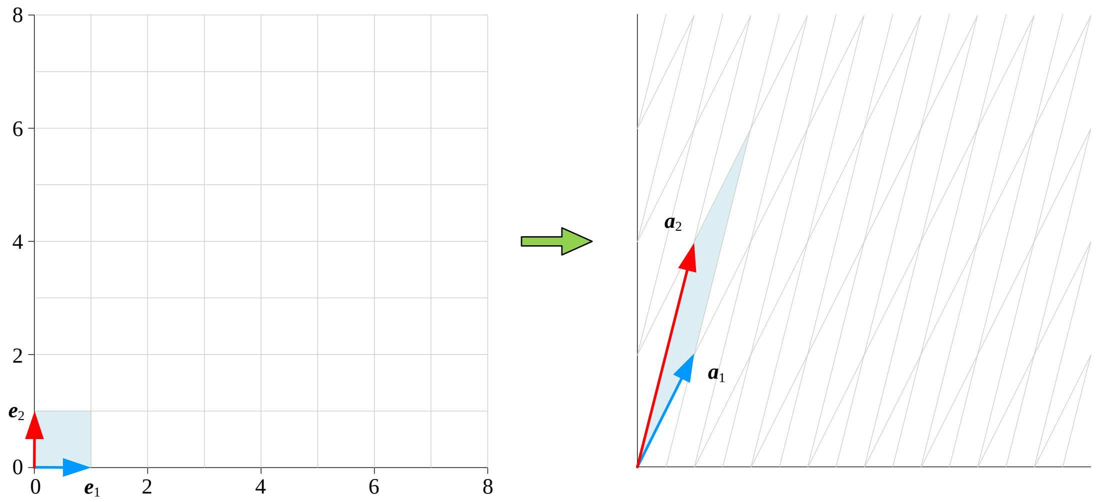


图 15. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 完成的线性变换

观察图 15 左图，整个直角坐标系整个方方正正的网格由 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 张成，就好比 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 是撑起这个二维空间的“骨架”。再看图 15 右图，$[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 同样张成了整个直角坐标系，不同的是网格为平行四边形。$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 和 $[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 都是空间 $\mathbb{R}^2$ 的**基底** (base)。

将 $\boldsymbol{A}$ 写成 $[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$，展开 (4) 得到：

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

上式代表基底 $[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 中两个基底向量的线性组合。

本书将在第 7 章专门讲解向量空间。

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 $\boldsymbol{A}$，我们可以把一个单位圆转化为旋转椭圆。图 16 中，任意向量 $\boldsymbol{x}$ 起点为原点，终点落在单位圆上，经过 $\boldsymbol{A}$ 的线性变换变成 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。

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)。

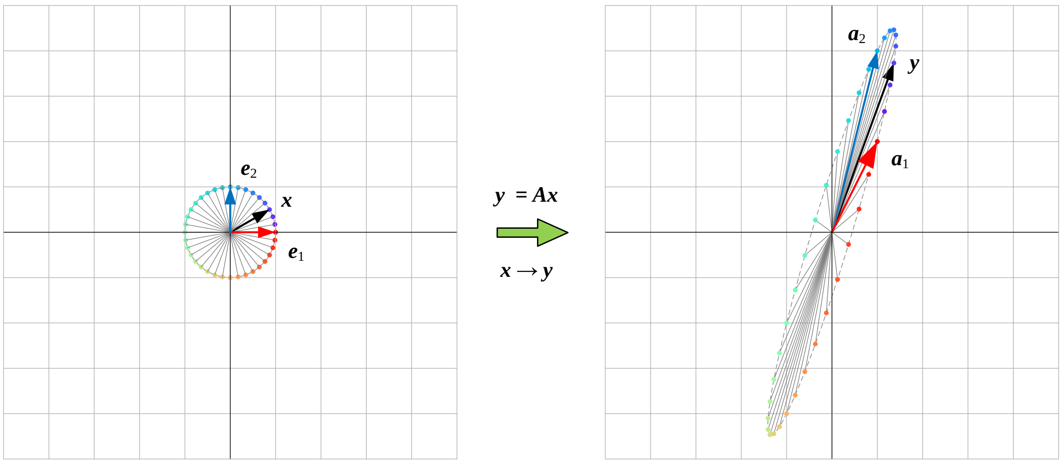


图 16. 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 将单位圆转化为旋转椭圆

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。

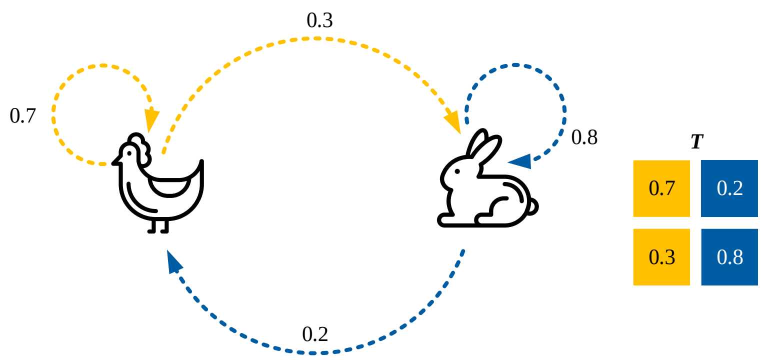


图 17. 鸡兔同笼三部曲中"鸡兔互变"，图片来自本系列丛书《数学要素》第 25 章

剧透一下，鸢尾花数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 本身并不能完成特征值分解。但是图 21 中的格拉姆矩阵 $\boldsymbol{G} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})$ 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 $\boldsymbol{V}$。正如图 15 右图中 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2]$ 张成了一个平面，矩阵 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3, \boldsymbol{v}_4]$ 则张成了一个 4 维空间！

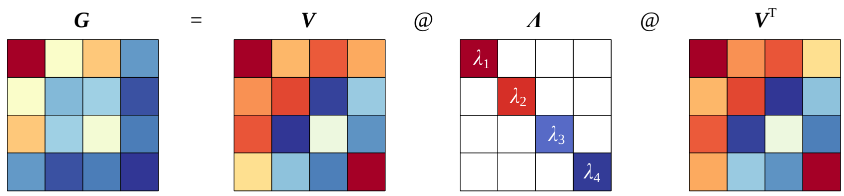


图 18. 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的格拉姆矩阵的特征值分解

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 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 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。

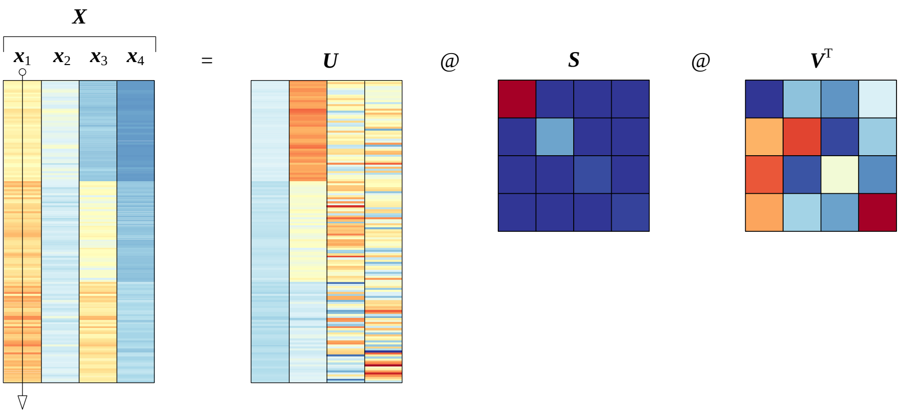


图 19. 对矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行 SVD 分解

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 $\boldsymbol{x}_1$)、花萼宽度 (第 2 列，列向量 $\boldsymbol{x}_2$)、花瓣长度 (第 3 列，列向量 $\boldsymbol{x}_3$) 和花瓣宽度 (第 4 列，列向量 $\boldsymbol{x}_4$)。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 (μ_j)，计算不同特征上样本数据的均方差 (σ_j)。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 μ_j、$\mu_j \pm \sigma_j$、$\mu_j \pm 2\sigma_j$ 对应的位置。

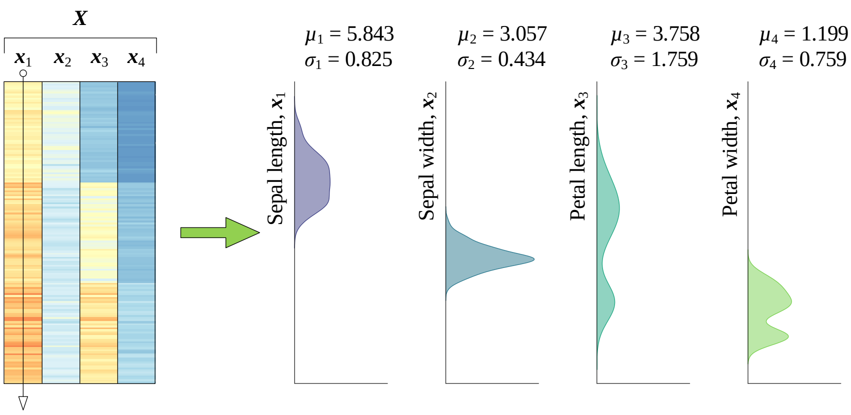


图 20. 鸢尾花数据每个特征的基本统计描述

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。

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 $\boldsymbol{X}$ 衍生得到的几种矩阵。注意，图 2 和图 21 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 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。

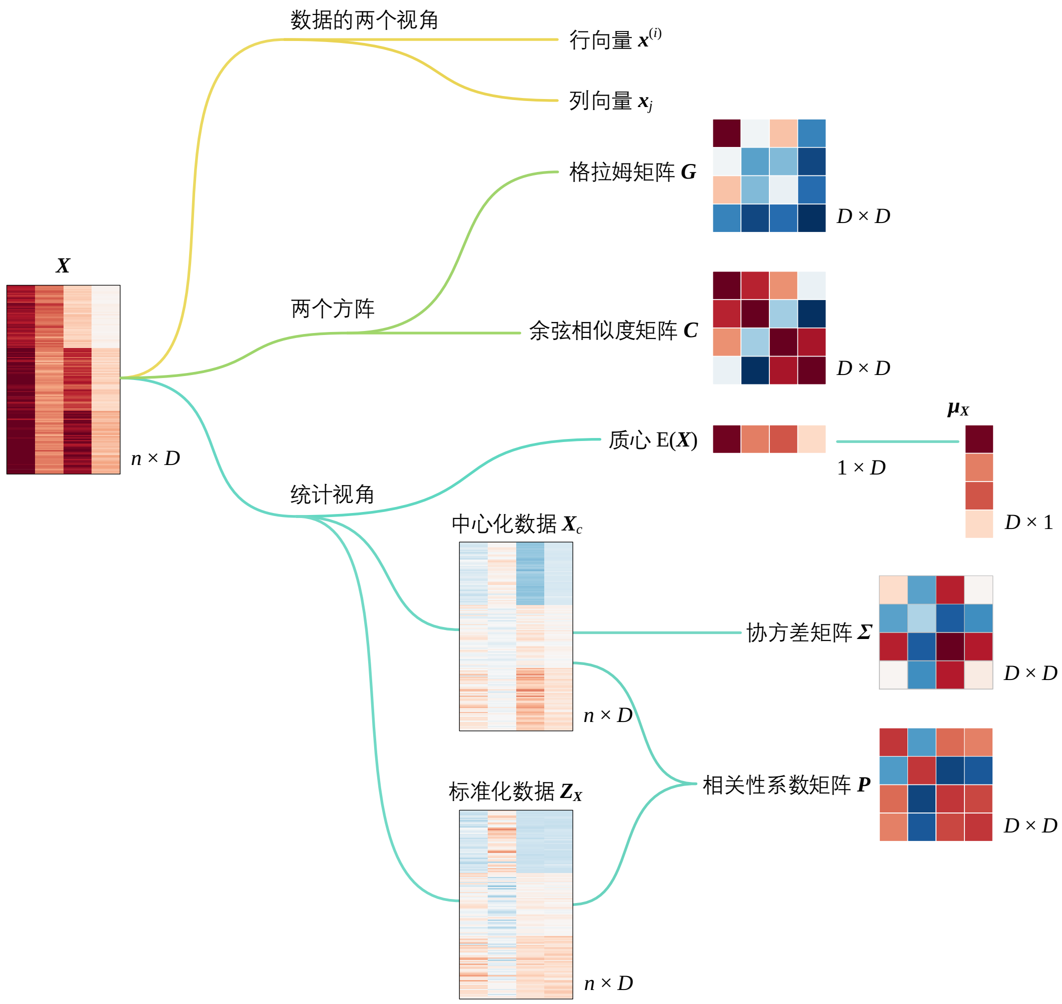


图 21. 鸢尾花数据衍生得到的几个矩阵，图片来自本书第 24 章

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