2 Vector Calculations 向量运算

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

- `matplotlib.pyplot.quiver()` 绘制箭头图
- `numpy.add()` 向量/矩阵加法
- `numpy.arccos()` 计算反余弦
- `numpy.array([[4,3]])` 构造行向量，注意双重方括号
- `numpy.array([[4,3]]).T` 行向量转置得到列向量，注意双重方括号
- `numpy.array([[4], [3]])` 构造列向量，注意双重方括号
- `numpy.array([4, 3])[:, None]` 构造列向量
- `numpy.array([4, 3])[:, numpy.newaxis]` 构造列向量
- `numpy.array([4, 3])[None, :]` 构造行向量
- `numpy.array([4, 3])[numpy.newaxis, :]` 构造行向量
- `numpy.array([4,3])` 构造一维数组，严格来说不是行向量
- `numpy.array([4,3]).reshape((-1, 1))` 构造列向量
- `numpy.array([4,3]).reshape((1, -1))` 构造行向量
- `numpy.array([4,3], ndmin=2)` 构造行向量
- `numpy.cross()` 计算列向量或行向量的向量积
- `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()` 默认计算 L2 范数
- `numpy.multiply()` 计算向量逐项积
- `numpy.ones()` 生成全 1 向量/矩阵
- `numpy.outer()` 计算外积、张量积
- `numpy.r_[]` 将一系列数组合并；`'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
- `numpy.r_['c', [4,3]]` 构造列向量
- `numpy.subtract()` 向量/矩阵减法
- `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
- `numpy.zeros()` 生成全 0 向量/矩阵
- `scipy.spatial.distance.cosine()` 计算余弦距离
- `zip(*)` 用于将可迭代的对象作为参数，将对象中对应的元素打包成一个个元组，然后返回由这些元组组成的列表。*代表解包，返回的每一个都是元祖类型，而并非是原来的数据类型

- **向量运算**
  - **介绍**
    - 定义：既有长度又有方向的量
    - 分类：行向量，列向量
    - 几何：切向量，法向量
    - 向量场：多元函数的梯度向量
  - **长度**
    - 向量模，欧几里得范数，L^2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**
    - 定义
    - 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
    - 和矩阵乘法关系

2.1 向量：多面手

几何视角

如图 1 所示，平面上，向量是**有方向的线段** (directed line segment)。**线段的长度代表向量的大小** (the length of the line segment represents the magnitude of the vector)。**箭头代表向量的方向** (the direction of the arrowhead indicates the direction of the vector)。

再次强调，本书中向量符号采用加粗、斜体、小写字母，比如 $\boldsymbol{a}$；矩阵符号则采用加粗、斜体、大写字母，比如 $\boldsymbol{A}$。

图 1 中，向量 $\boldsymbol{a}$ 的**起点** (initial point) 是原点 O，向量的**终点** (terminal point) 是 A。如果向量的起点和终点相同，向量则为**零向量** (zero vector)，可以表示为 $\boldsymbol{0}$。

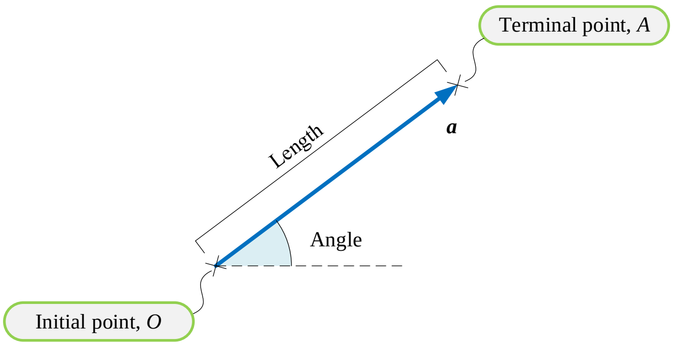


图 1. 向量起点、终点、大小和方向

图 2 给出的是几种向量的类型。

和起点无关的向量叫做**自由向量** (free vector)，如图 2 (a)。和起点有关的向量被称作，**固定向量** (fixed vector)，如图 2 (b) 和 (c)。称方向上沿着某一个特定直线的向量为**滑动向量** (sliding vector)，如图 2 (d)。

没有特别说明时，本书的向量一般是固定向量，且起点一般都在原点，除非特别说明。

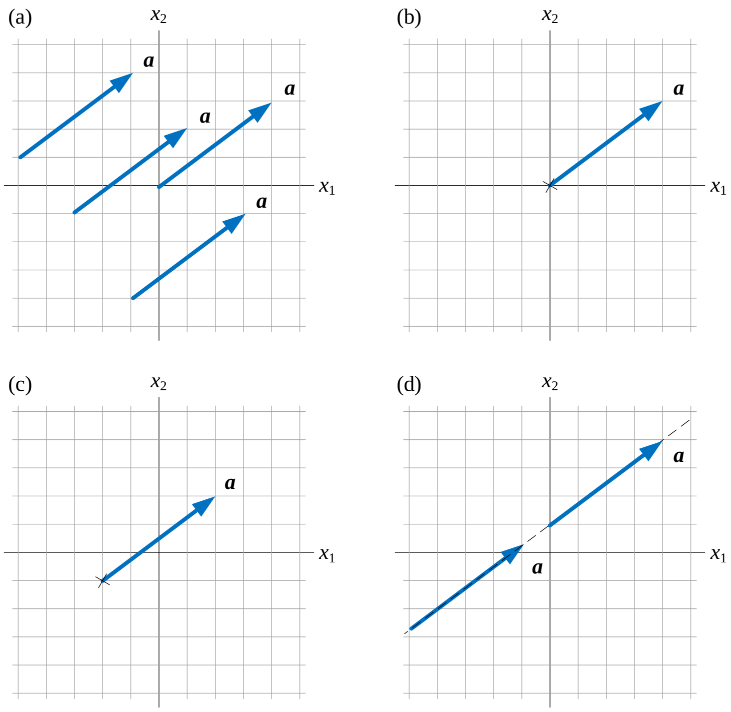


图 2. 几种向量类型

坐标点

从解析几何角度看，向量和坐标存在直接联系。

一般情况下直角坐标系中任意一点坐标可以通过**多元组** (tuple) 来表达。比如，图 3 (a) 所示平面直角坐标系上，A 点坐标为 $(4, 3)$，B 点坐标为 $(-3, 4)$。

图 3 (b) 所示，以原点 O 作为向量起点 A 为终点的向量 $\overrightarrow{OA}$ 对应向量 $\boldsymbol{a}$，而 $\overrightarrow{OB}$ 对应向量 $\boldsymbol{b}$。

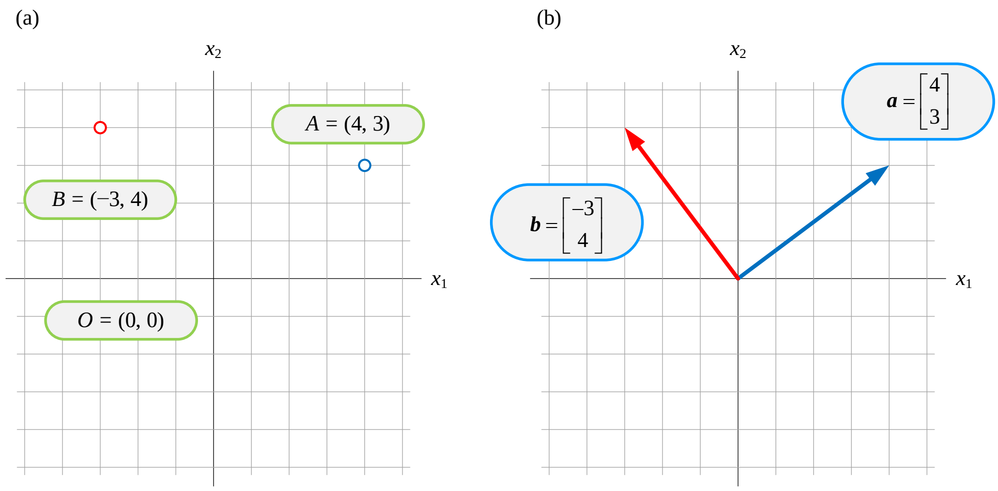


图 3. 平面坐标和向量关系

向量的元素也可以是未知量，比如 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^{\mathrm{T}}$、$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \dots, x_D]^{\mathrm{T}}$。

Bk4_Ch2_01.py 绘制图 3 (b) 所示向量。matplotlib.pyplot.quiver() 绘制箭头图。

继续丰富向量几何内涵

几何上，切线指的是一条刚好触碰到曲线上某一点的直线。曲线的法线则是垂直于曲线上一点的切线的直线。将向量引入切线、法线可以得到**切向量** (tangent vector) 和**法向量** (normal vector)。图 4 所示为直线和曲线某一点处的切向量和法向量，两个向量的起点都是**切点** (point of tangency)。

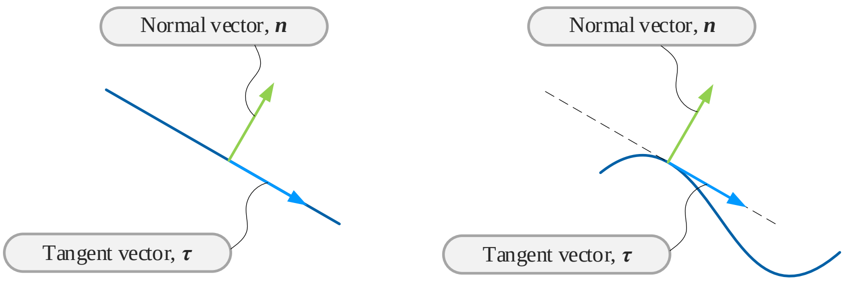


图 4. 切向量和法向量

梯度

自然界的风、水流、电磁场，在各自空间的每一个点上对应的物理量既有强度、也有方向。将这些既有大小又有方向的场抽象出来便得到**向量场** (vector field)。本书中，我们会使用向量场来描述函数在一系列排列整齐点的梯度向量。

图 5 (a) 所示为某个二元函数 $f(x_1, x_2)$ 对应的曲面。把图 5 (a) 比作一座山峰的话，在坡面上放置一个小球，松手瞬间小球运动的方向在 x_1x_2 平面上的投影就是梯度下降方向，也叫做下山方向；而它的反方向叫做**梯度向量** (gradient vector) 方向，也叫上山方向。图 5 (b) 所示为在 x_1x_2 平面上，二元函数 $f(x_1, x_2)$ 在不同点处的平面等高线和梯度向量。仔细观察，可以发现任意一点处梯度向量垂直于该点处等高线。

二元函数 $f(x_1, x_2)$ 梯度向量定义如下：

$$\operatorname{grad} f\left(x_1, x_2\right) = \nabla f\left(x_1, x_2\right) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f}{\partial x_2} \end{bmatrix} \tag{1}$$

在 $f(x_1, x_2)$ 梯度向量中，我们看到了两个偏导数。

本书将在第 17 章回顾偏导数并讲解梯度向量。

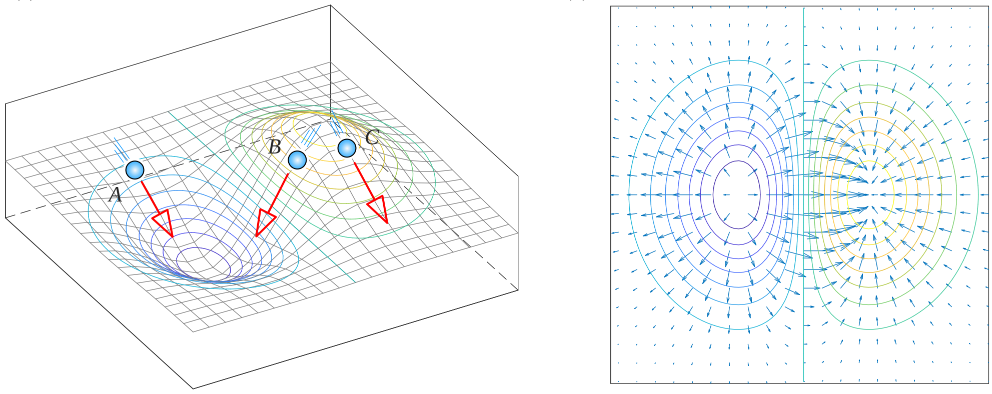


图 5. 梯度向量

2.2 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)。

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 6 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。

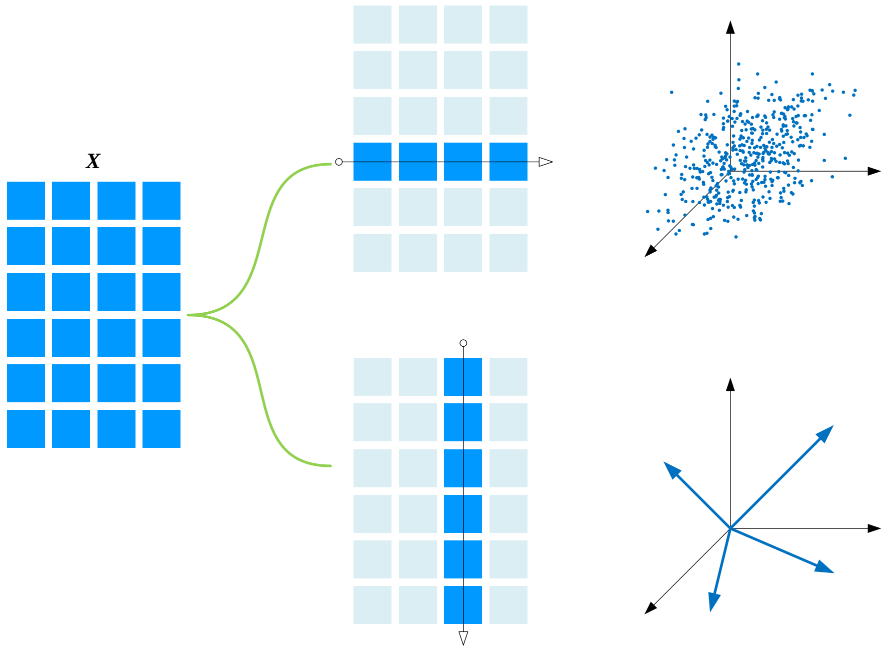


图 6. 观察数据矩阵的两个视角

行向量：一行多列，一个样本数据点

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

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

如图 7 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 $^{\mathrm{T}}$。

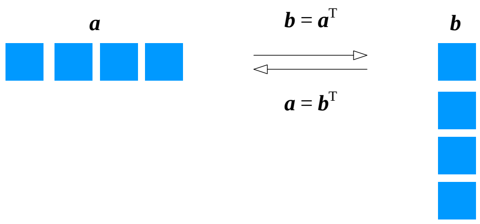


图 7. 行向量的转置是列向量

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. 用 Numpy 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。

前文提过，数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的每一行代表一个样本点。为了方便区分，$\boldsymbol{X}$ 的行向量序号采用“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 8 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写成一组行向量上下叠放：

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

⚠ 再次强调，数据分析偏爱用行向量表达样本点。

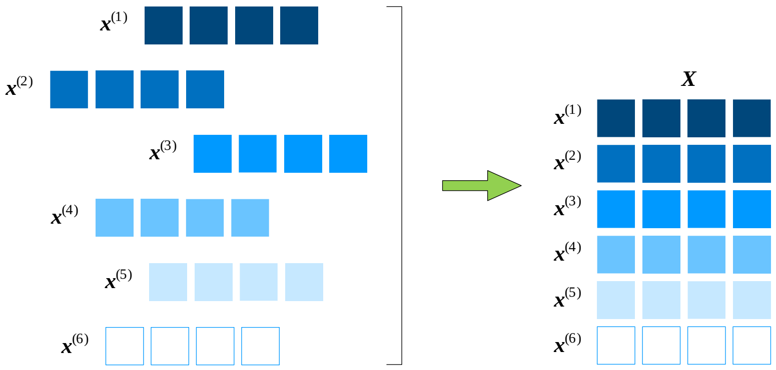


图 8. 矩阵由一系列行向量构造

列向量：一列多行，一个特征样本数据

列向量将 n 个元素排成一列，形状为 $n \times 1$ (即 n 行、1 列)。举个例子，下式中列向量 $\boldsymbol{b}$ 为 4 行 1 列：

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

⚠ 注意，不加说明时，本书中向量一般指的是列向量。

构造 $\boldsymbol{X}$ 的列向量序号则采用下标表达，比如 $\boldsymbol{x}_1$。如图 9 所示，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 看做是 4 个等长列向量整齐排列得到：

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{x}_3 & \boldsymbol{x}_4 \end{bmatrix} \tag{5}$$

数据分析偏爱列向量表达特征，比如 $\boldsymbol{x}_j$ 代表第 j 个特征上的样本数据构成的列向量。因此，列向量又常称作**特征向量** (feature vector)。$\boldsymbol{x}_j$ 对应概率统计的随机变量 X_j，或者代数中的变量 x_j。

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

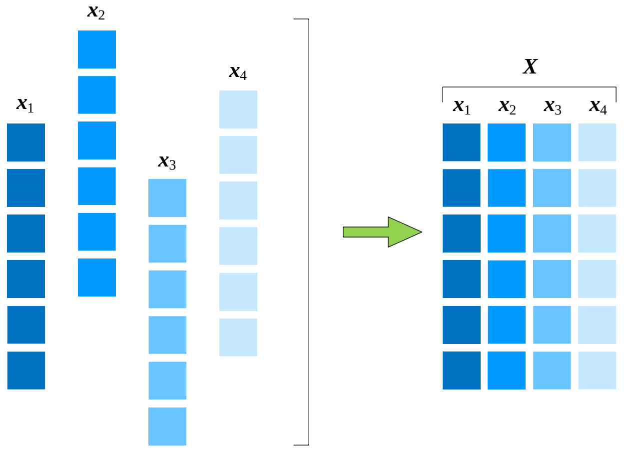


图 9. 矩阵由一排列向量构造

表 2 总结 Numpy 构造列向量几种常见方法。

表 2. 用 Numpy 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
`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：

$$\boldsymbol{0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{6}$$

代码 `numpy.zeros((4,1))` 可以生成 4×1 全 0 列向量。多维空间中，原点也常记做零向量 $\boldsymbol{0}$。

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

$$\mathbf{1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{7}$$

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

全 1 列向量 $\mathbf{1}$ 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。

2.3 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 $\boldsymbol{a}$:

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{8}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 的模为:

$$\|\boldsymbol{a}\| = \|\boldsymbol{a}\|_2 = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \cdots a_n^2} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{9}$$

观察上式，容易知道向量模非负，即 $\|\boldsymbol{a}\| \geq 0$。

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 章将介绍其他范数。

二维向量的模

特别地，对于如下二维向量 $\boldsymbol{a}$:

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{10}$$

二维向量指的是有两个元素的向量。

二维向量 $\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数为:

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2} \tag{11}$$

图 3 (b) 中向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的模可以这样计算得到:

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{4^2 + 3^2} = \sqrt{25} = 5$$
$$\|\boldsymbol{b}\| = \sqrt{(-3)^2 + 4^2} = \sqrt{25} = 5 \tag{12}$$

二维向量 $\boldsymbol{a}$ 和横轴夹角可以通过反正切求解：

$$\theta_a = \arctan\left(\frac{a_2}{a_1}\right) \tag{13}$$

上述角度和直角坐标系直接关联，因此可以视作"绝对角度"。本章后续将介绍如何用向量内积求两个向量之间的"相对角度"。

Bk4_Ch2_02.py 计算图 3 (b) 中向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 模。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。

等距线

值得一提的是，如果起点重合，和 $\|\boldsymbol{a}\|$ 等长的二维向量的终点位于同一个圆上，如图 10 (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"。

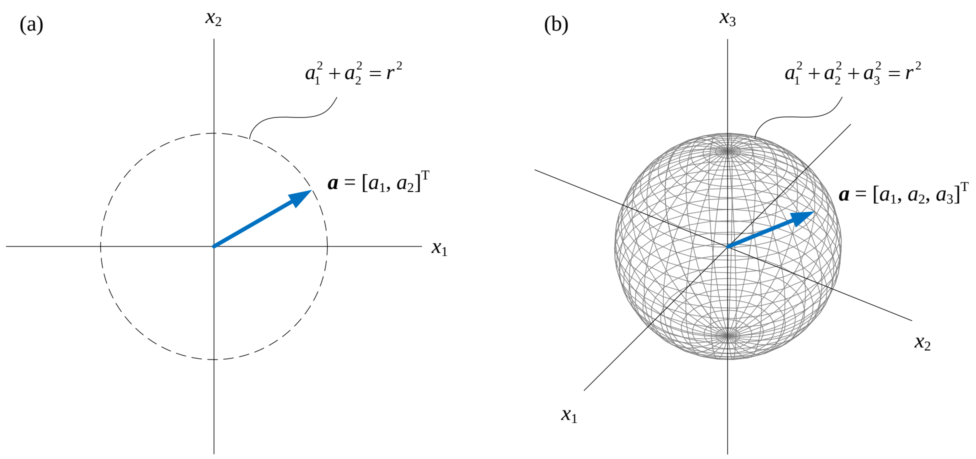


图 10. 等 L^2 范数向量

如图 11 所示，起点位于原点的二维向量 $\boldsymbol{x}$ 的模 $\|\boldsymbol{x}\|$ 取不同数值 c 时，我们可以得到一系列同心圆，对应的解析式如下：

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = c \tag{14}$$

强调一点，$\boldsymbol{x}$ 是向量，既有大小、又有方向；而 $\|\boldsymbol{x}\|$ 是标量，代表"距离"。$\|\cdot\|$ 这个运算符代表某种"向量 → 标量"的运算规则。

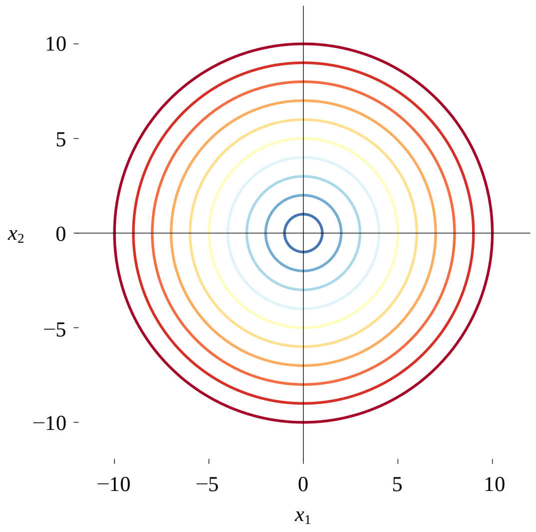


图 11. 起点为 $\boldsymbol{0}$、L^2范数相等的向量终点位于一系列同心圆上

Bk4_Ch2_03.py 绘制图 11。

三维向量的模

类似地，给定三维向量 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{15}$$

三维向量 $\boldsymbol{a}$ 的 L^2范数为：

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2} \tag{16}$$

如图 10 (b) 所示，起点为原点的等长三维向量终点落在同一正圆球面上。

单位向量

长度为 1 的向量叫做**单位向量** (unit vector)。

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

$$\hat{\boldsymbol{a}} = \frac{\boldsymbol{a}}{\|\boldsymbol{a}\|} \tag{17}$$

$\hat{\boldsymbol{a}}$ 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 12 (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：

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} = 1 \quad \Rightarrow \quad x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{18}$$

这无数个单位向量 $\boldsymbol{x}$ 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 12 (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：

$$\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{19}$$

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

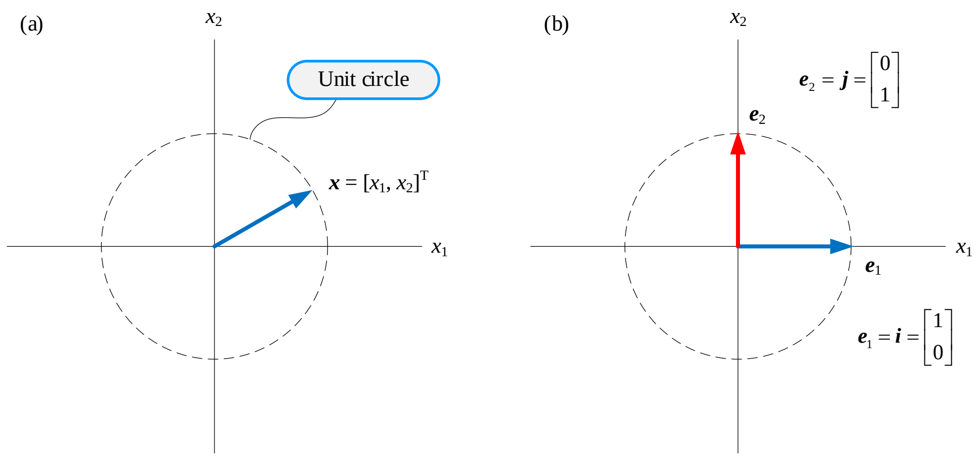


图 12. 单位向量

张成

图 3 (b) 给出向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 可以用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 合成得到：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} &= 4\boldsymbol{e}_1 + 3\boldsymbol{e}_2 \\ \boldsymbol{b} &= -3\boldsymbol{e}_1 + 4\boldsymbol{e}_2 \end{aligned} \tag{20}$$

(20) 用到的便是向量加减法，这是下一节要介绍的内容。

图 3 (b) 整个平面就是用 $\boldsymbol{e}_1$ 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 $\boldsymbol{x}$ 都可以写成：

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 \tag{21}$$

从集合角度来看，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2$。

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 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) 代表沿着 x_1、x_2 和 x_3 单位向量:

$$\boldsymbol{e}_1 = \boldsymbol{i} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{j} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \boldsymbol{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{22}$$

如图 13 所示，$\boldsymbol{e}_1$ ($\boldsymbol{i}$)、$\boldsymbol{e}_2$ ($\boldsymbol{j}$) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($\boldsymbol{k}$) 两两相互垂直。

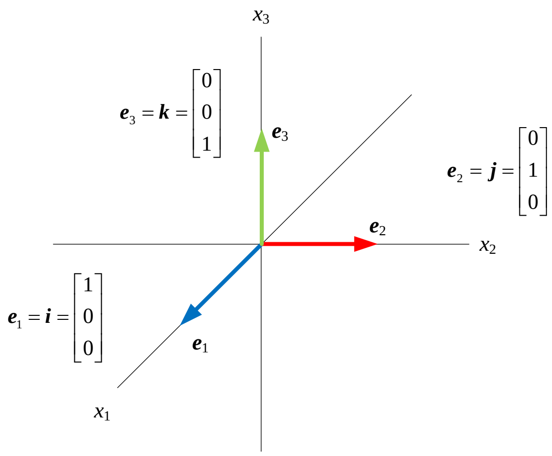


图 13. 三维空间单位向量

同理，图 13 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 $\boldsymbol{x}$ 可以写成:

$$\boldsymbol{x} = x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3 \tag{23}$$

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:

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{24}$$

上式中几个 $\boldsymbol{e}_1$ 虽然维度不同，但是本质上等价，它们代表不同维度空间中的 $\boldsymbol{e}_1$。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。

2.4 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：

$$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-2\\5\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}5\\-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2+5\\5-1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\4\end{bmatrix} \tag{25}$$

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：

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

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 14 所示。

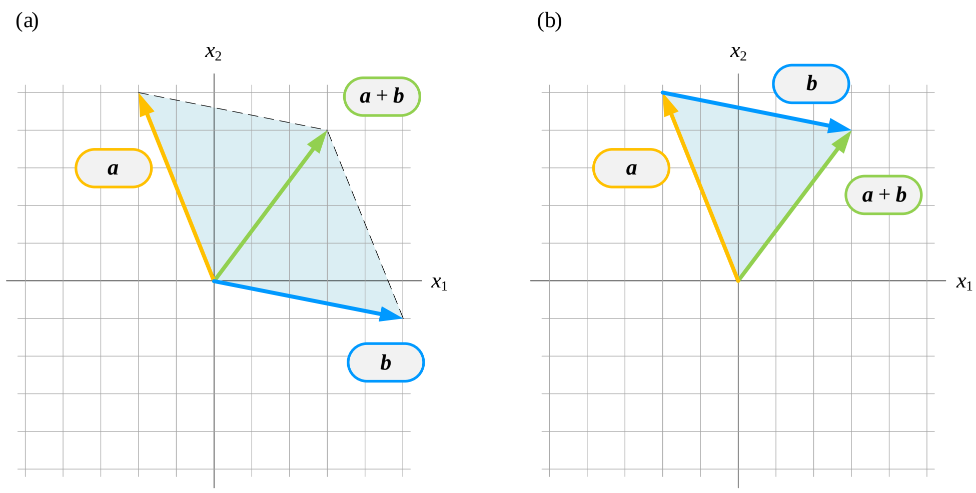


图 14. 几何角度看向量加法

向量减法 (vector subtraction) 可以写成向量加法。比如，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 $\boldsymbol{a}$ 与向量$-\boldsymbol{b}$ 之和，即：

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

两个向量相同，当且仅当两者大小方向均相同。如果两个向量的模 (长度) 相同但是方向相反，两者互为反向量。若两个向量方向相同或相反，则称向量平行。

请大家注意以下向量加减法性质：

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

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

Bk4_Ch2_04.py 计算本节向量加减法示例。

2.5 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。

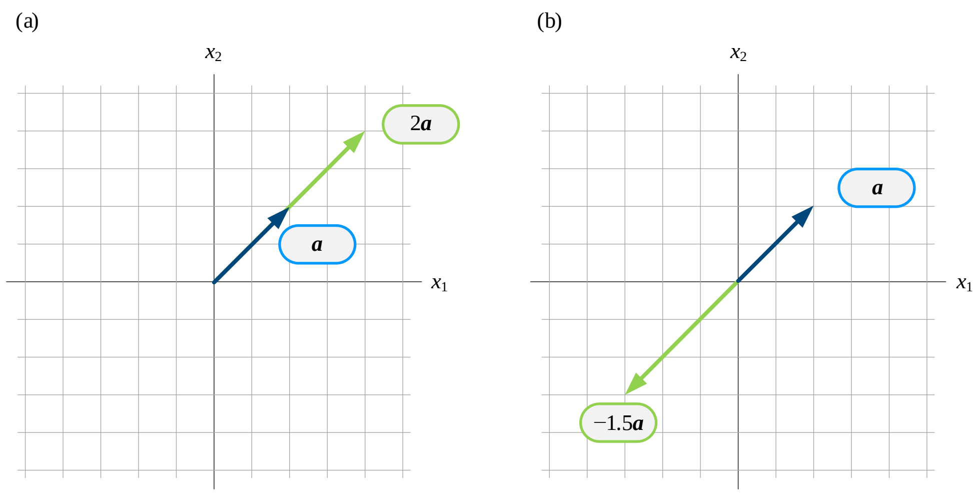


图 15. 向量标量乘法

从几何角度来看，标量乘法将原向量按标量比例缩放，结果中向量方向同向或反向，如图 15 所示。

Bk4_Ch2_05.py 完成图 15 中运算。

请大家注意以下向量标量乘法性质：

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

其中，t 和 k 为标量。

2.6 向量内积：结果为标量

向量内积 (inner product)，又叫**标量积** (scalar product)、**点积** (dot product)、点乘。注意，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：

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\rangle=\sum_{i=1}^{n}a_ib_i=a_1b_1+a_2b_2+\ldots+a_nb_n\tag{31}$$

(31) 也适用于两个等长行向量计算内积。注意，向量内积也是一种"向量 → 标量"的运算规则。

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

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}4\\3\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}5\\-2\end{bmatrix}=4\times5+3\times(-2)=14\tag{32}$$

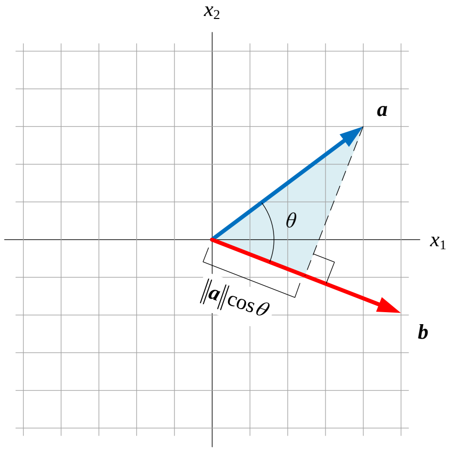


图 16. ***a*** 和 ***b*** 两个平面向量

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 Σ 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 16 所示，从几何角度看，向量内积相当于两个向量的模 (L^2 范数) 与它们之间夹角余弦值三者之积：

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

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

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

$\boldsymbol{a}$ 的 L^2 范数也可以通过向量内积求得：

$$\|\boldsymbol{a}\|_2=\|\boldsymbol{a}\|=\sqrt{\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}}=\sqrt{\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle} \tag{37}$$

(37) 左右等式平方得到：

$$\|\boldsymbol{a}\|_2^2=\|\boldsymbol{a}\|^2=\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}=\langle\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}\rangle \tag{38}$$

上式相当于"距离的平方"。

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 17 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。

平面上，非零向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 垂直，$\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 夹角为 90°，两者向量内积为 0：

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

多维向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 向量内积为 0，我们称 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ **正交** (orthogonal)。本书上一章提到，正交是线性代数的概念，是垂直的推广。

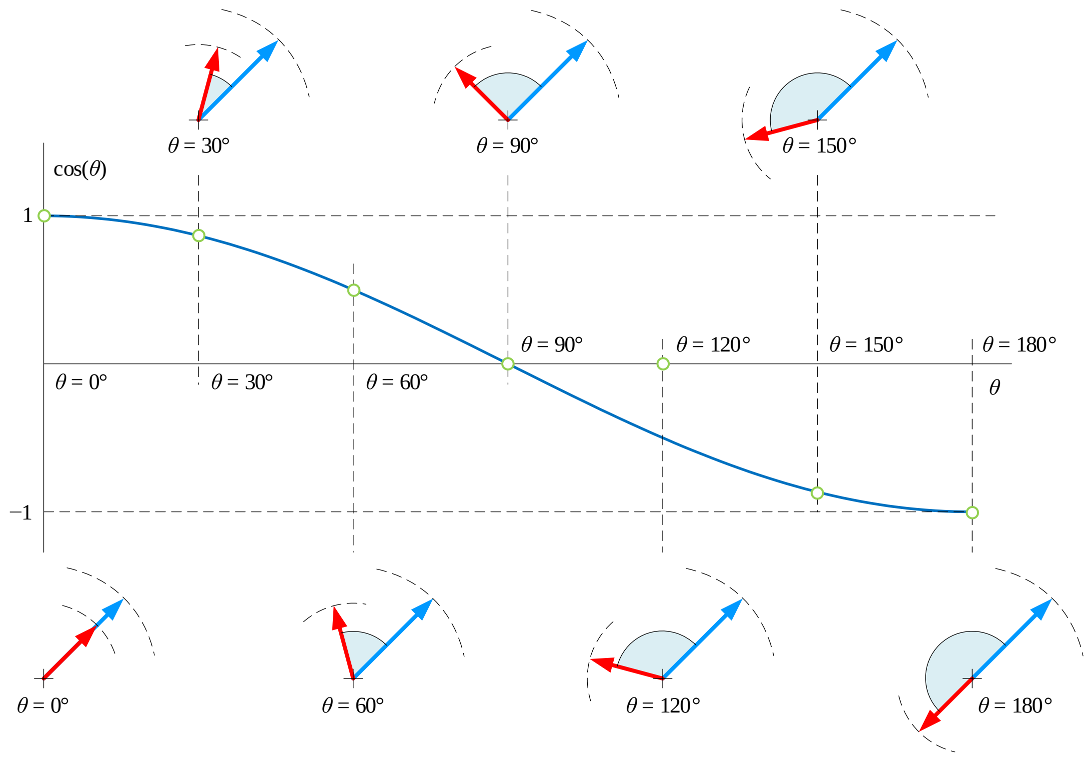


图 17. 向量夹角

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：

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

$|\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}|$ 代表 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 向量内积绝对值。

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 18 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 18 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 $\boldsymbol{c}$：

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

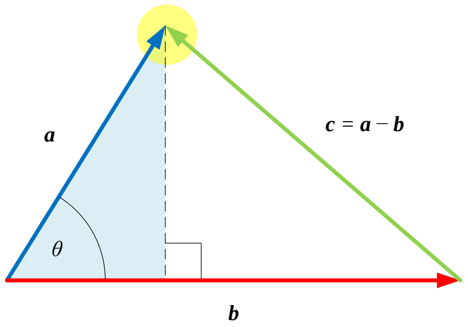


图 18. 余弦定理

(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：

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

计算 A 和 B 两点的距离 AB：

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

用起点位于原点的向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别代表 A 和 B 点，AB 距离就是 $\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b}$ 的 L_2 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：

$$\operatorname{cov}(X,Y)=\frac{(\boldsymbol{x}-\mu_X)\cdot(\boldsymbol{y}-\mu_Y)}{n-1} \tag{60}$$

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。

2.7 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”。而 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{e}_1$ 的夹角可以视作“绝对夹角”。

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：

$$\begin{cases}\cos\theta_a=\dfrac{a_1}{\|\boldsymbol{a}\|}, & \sin\theta_a=\dfrac{a_2}{\|\boldsymbol{a}\|}\\[2ex] \cos\theta_b=\dfrac{b_1}{\|\boldsymbol{b}\|}, & \sin\theta_b=\dfrac{b_2}{\|\boldsymbol{b}\|}\end{cases} \tag{64}$$

θ_a 和 θ_b 就相当于绝对角度。

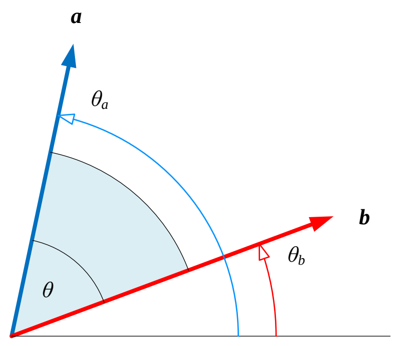


图 19. 极坐标中解释向量夹角

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 $\boldsymbol{b}$，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 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 分别代表为沿着 x_1 和 x_2 单位向量。它们相互正交，也就是向量内积为 0：

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

在一个平面上，单位向量 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 相互垂直，它俩"张起"的方方正正的网格，就是标准直角坐标系，具体如图 20 (a) 所示。

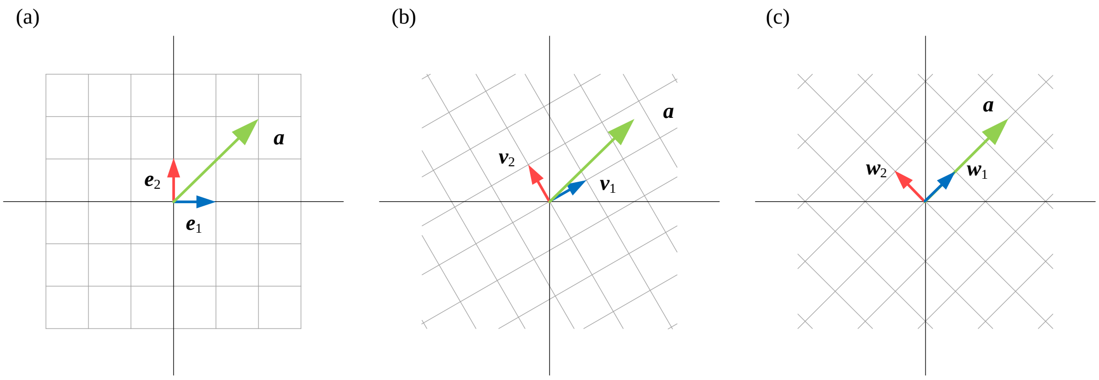


图 20. 向量 $\boldsymbol{a}$ 在三个不同的正交直角坐标系中位置

而平面上，成对正交单位向量有无数组，比如图 21 所示平面两组正交单位向量：

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

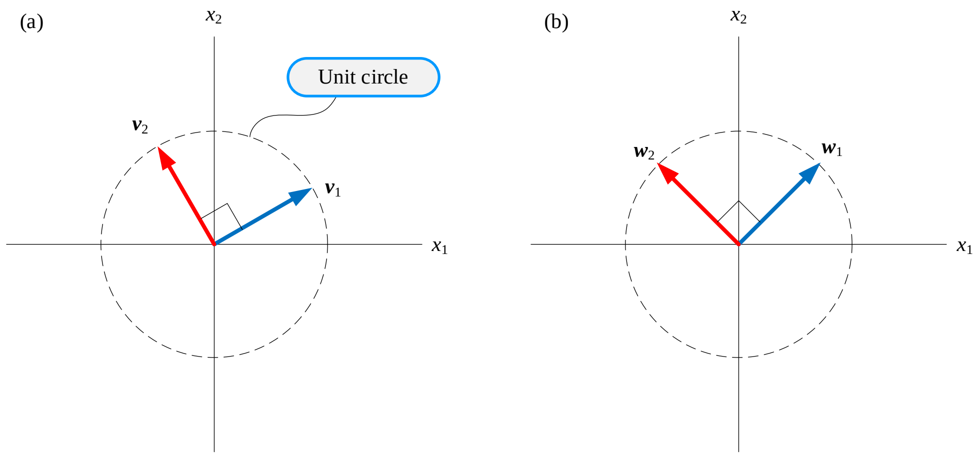


图 21. 两组正交单位向量

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 构造如图 20 (b) 所示直角坐标系。类似地，$\boldsymbol{w}_1$、$\boldsymbol{w}_2$ 也可以构造如图 20 (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。

比较图 20 三幅子图，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 20 (a) 所示直角坐标系的坐标值很容易确定为 (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 20 (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。

2.8 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 $\cos(\theta) = 1$。若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。此外，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：

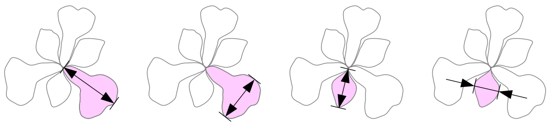
$$d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - k(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}) = 1 - \frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{q}}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{q}\|} \tag{72}$$

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。

本书下一章，以及《概率统计》、《机器学习》将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 22 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

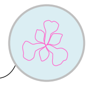


图 22. 鸢尾花的四个样本数据

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，也就是不相似。

给大家留个思考题，鸢尾花数据有 150 个数据点，任意两个数据点可以计算得到一个余弦相似度。因此成对余弦相似度有 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。

2.9 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 23 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 24 所示。图 24 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。

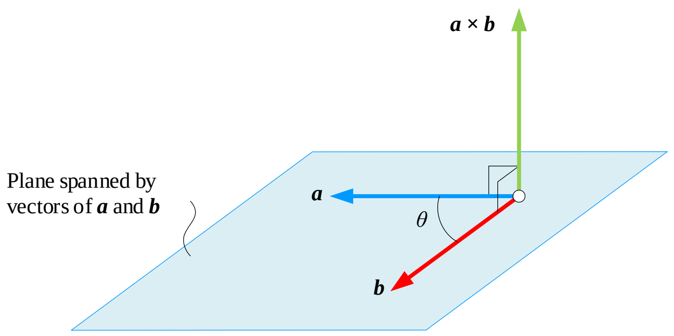


图 23. $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 垂直于向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 构成平面

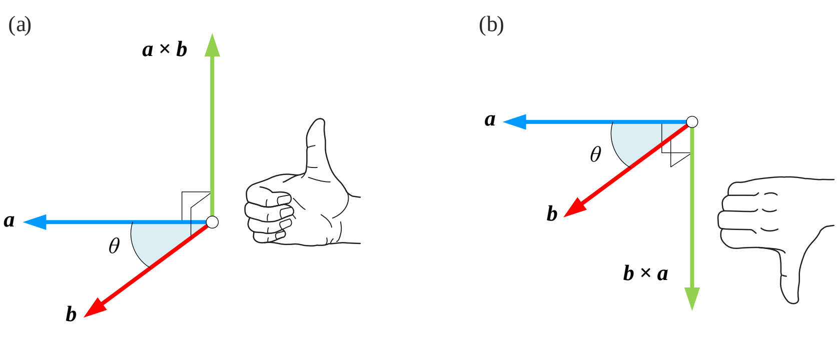


图 24. 向量叉乘右手定则

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 25 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。

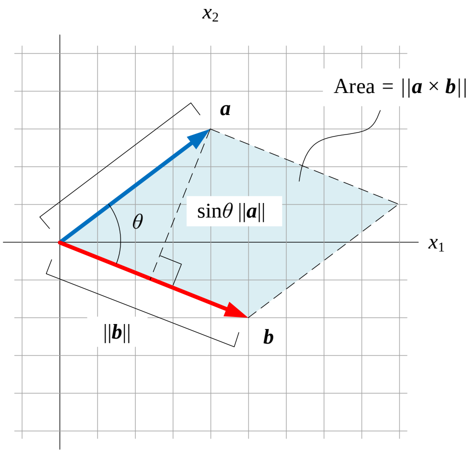


图 25. $\boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b}$ 向量积的几何含义

正交向量之间的叉乘

如图 26 (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) 向量叉乘关系存在如下关系：

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

图 26 (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：

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

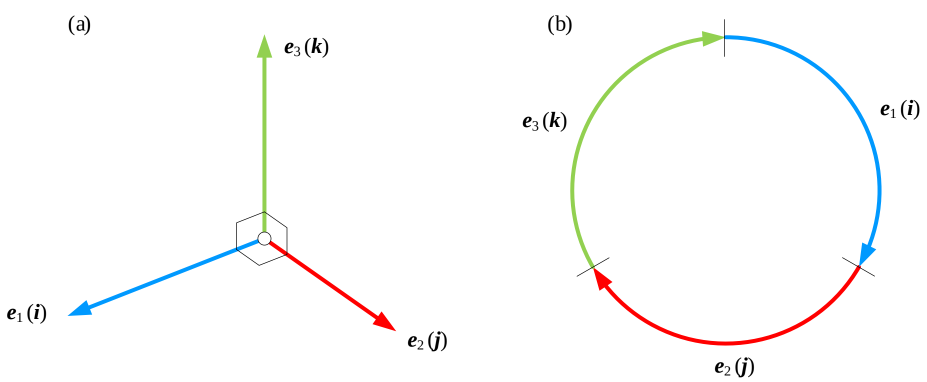


图 26. 三维空间正交单位向量基底之间关系

特别的，向量与自身叉乘等于 $\boldsymbol{0}$ 向量，比如：

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

下列为叉乘运算常见性质：

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{a}=\boldsymbol{0}\\
&\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})=\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{c}\\
&(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})\times\boldsymbol{c}=\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{c}\\
&\boldsymbol{a}\times(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})\neq(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\times\boldsymbol{c}\\
&k(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})=k(\boldsymbol{a})\times\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}\times(k\boldsymbol{b})\\
&\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})=(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{c}
\end{aligned} \tag{79}$$

任意两个向量的叉乘

在三维直角坐标系中，用 $\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 表达向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{a}&=a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}\\
\boldsymbol{b}&=b_1\boldsymbol{i}+b_2\boldsymbol{j}+b_3\boldsymbol{k}
\end{aligned} \tag{80}$$

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

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}&=(a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k})\times(b_1\boldsymbol{i}+b_2\boldsymbol{j}+b_3\boldsymbol{k})\\
&=a_1b_1(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{i})+a_1b_2(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{j})+a_1b_3(\boldsymbol{i}\times\boldsymbol{k})\\
&\quad+a_2b_1(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{i})+a_2b_2(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{j})+a_2b_3(\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{k})\\
&\quad+a_3b_1(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{i})+a_3b_2(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{j})+a_3b_3(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k})\\
&=(a_2b_3-a_3b_2)\boldsymbol{i}+(a_3b_1-a_1b_3)\boldsymbol{j}+(a_1b_2-a_2b_1)\boldsymbol{k}
\end{aligned} \tag{81}$$

$\boldsymbol{a}$ 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。

举个例子

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

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

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

$$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\-1\\3\end{bmatrix} \tag{83}$$

Bk4_Ch2_11.py 计算得到 (83)。其中，numpy.cross() 函数可以用来计算列向量和行向量的向量积。

2.10 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 27 给出的是从数据角度看向量逐项积运算。

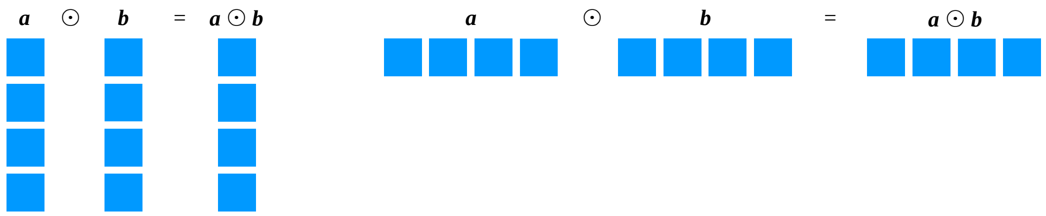


图 27. 向量逐项积运算

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

$$\begin{aligned}\boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{84}$$

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

$$\boldsymbol{a} \odot \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} a_1 b_1 & a_2 b_2 & \cdots & a_n b_n \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{85}$$

Bk4_Ch2_12.py 计算行向量逐项积。

2.11 向量张量积：张起网格面

张量积 (tensor product) 又叫**克罗内克积** (Kronecker product)，两个列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 张量积 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$ 定义如下：

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times1}\otimes\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_m\end{bmatrix}_{m\times1}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}b_1\\b_2\\\vdots\\b_m\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1b_1&a_1b_2&\cdots&a_1b_m\\a_2b_1&a_2b_2&\cdots&a_2b_m\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\a_nb_1&a_nb_2&\cdots&a_nb_m\end{bmatrix}_{n\times m}\tag{86}$$

Error! Reference source not found. (a) 给出上述运算的示意图。

⚠ 注意，(86) 上式中 $\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 为向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$ 的矩阵乘法。本书第 4、5、6 三章要从不同角度讲解矩阵乘法。

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

$$\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times1}\otimes\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}_{n\times1}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}a_1a_1&a_1a_2&\cdots&a_1a_n\\a_2a_1&a_2a_2&\cdots&a_2a_n\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\a_na_1&a_na_2&\cdots&a_na_n\end{bmatrix}\tag{87}$$

Error! Reference source not found. (b) 给出上述运算的示意图。

请大家注意张量积一些常见性质：

$$\begin{aligned}&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{a}\\&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{a}\\&(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{v}+\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{v}\\&\boldsymbol{v}\otimes(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})=\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{a}+\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{b}\\&t(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})=(t\boldsymbol{a})\otimes\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}\otimes(t\boldsymbol{b})\\&(\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b})\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}\otimes(\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{v})\end{aligned}\tag{88}$$

几何视角

图 28 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 $\boldsymbol{a}\otimes\boldsymbol{b}$。

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，这个缩放比例就是 a_i。a_i 是向量 $\boldsymbol{a}$ 中的某一个元素。

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。

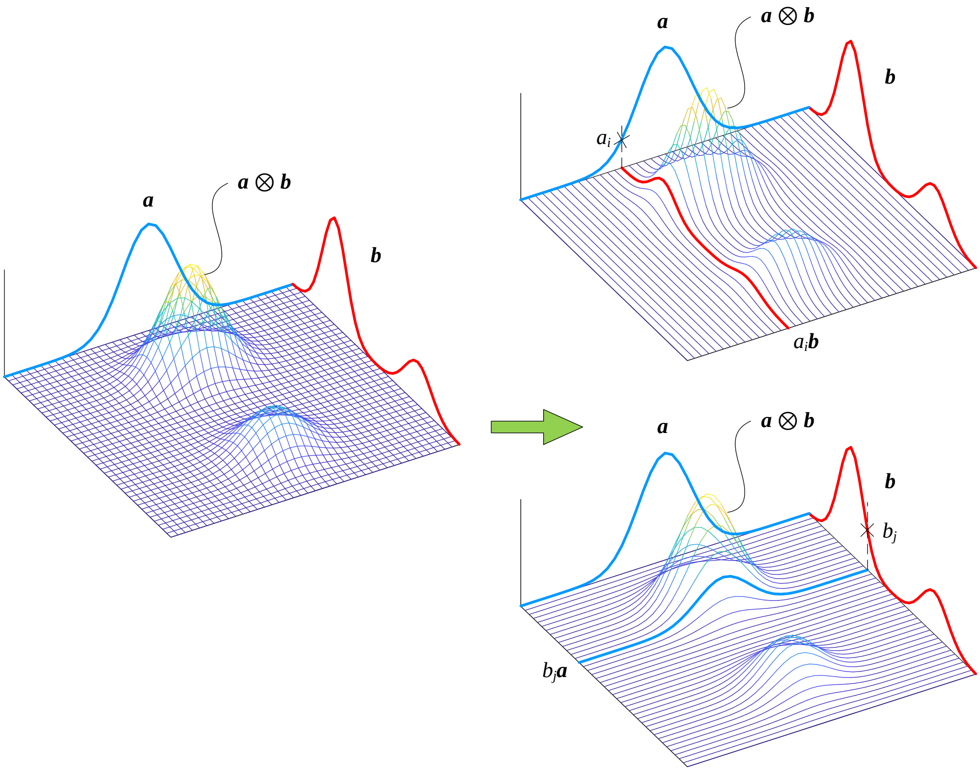


图 28. 从几何角度解释向量张量积

举个例子

给定列向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 分别为：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} &= \begin{bmatrix} 0.5 & -0.7 & 1 & 0.25 & -0.6 & -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{b} &= \begin{bmatrix} -0.8 & 0.5 & -0.6 & 0.9 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \end{aligned} \tag{89}$$

图 29 所示为张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 结果热图，形状为 6 × 4。

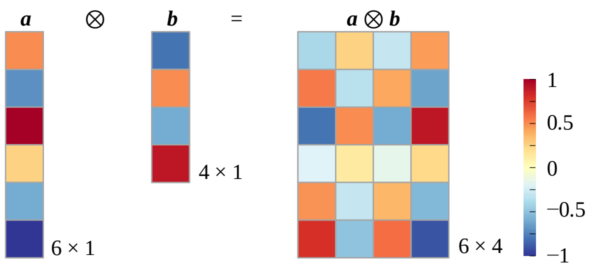


图 29. 张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 热图

观察 (86)，利用矩阵乘法展开，发现 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 可以写成两种形式：

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

上式中，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。如果对于 (90) 这种矩阵乘法展开方式感到陌生，请大家读完第 4 ~ 6 章后再回头看这部分内容。

如图 30 (a) 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 30 (b) 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”。

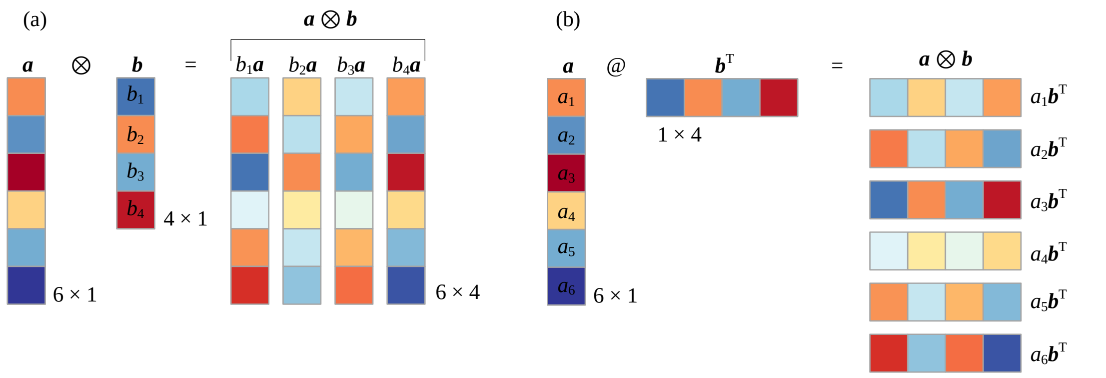


图 30. $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{b}$ 的列、行存在的相似

图 31 (a) 所示为张量积 $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{a}$ 结果热图，形状为 6 × 6 方阵。图 31 (b) 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。

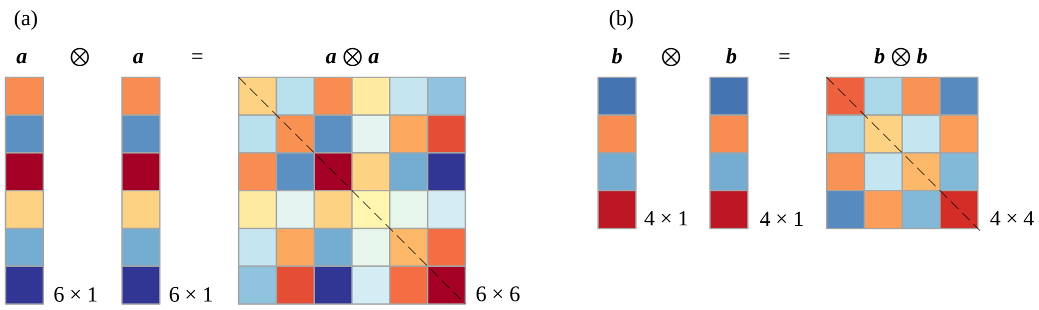


图 31. $\boldsymbol{a} \otimes \boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b} \otimes \boldsymbol{b}$ 向量张量积

Bk4_Ch2_13.py 绘制图 29、图 30、图 31。

《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：

$$\underbrace{p_{X,Y}(x,y)}_{\text{Joint}} = \underbrace{p_X(x)}_{\text{Marginal}} \cdot \underbrace{p_Y(y)}_{\text{Marginal}} \tag{91}$$

如图 32 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 $p_{X,Y}(x,y)$ 相当于矩阵。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。

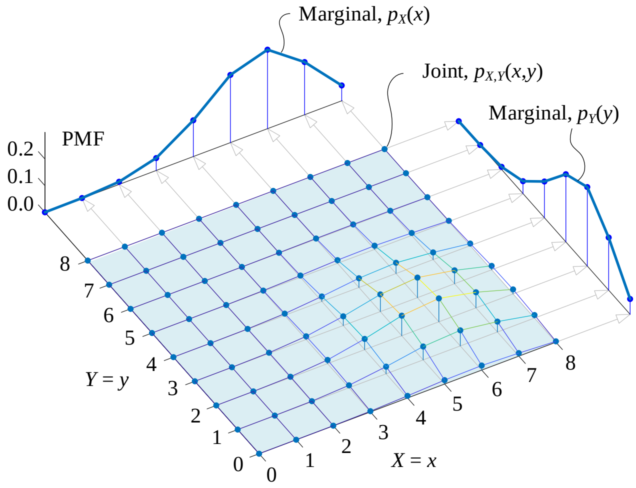


图 32. 离散随机变量独立条件下，联合概率 $p_{X,Y}(x,y)$ 等于 $p_Y(y)$ 和 $p_X(x)$ 乘积

本章聊了聊向量常见运算。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。

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。

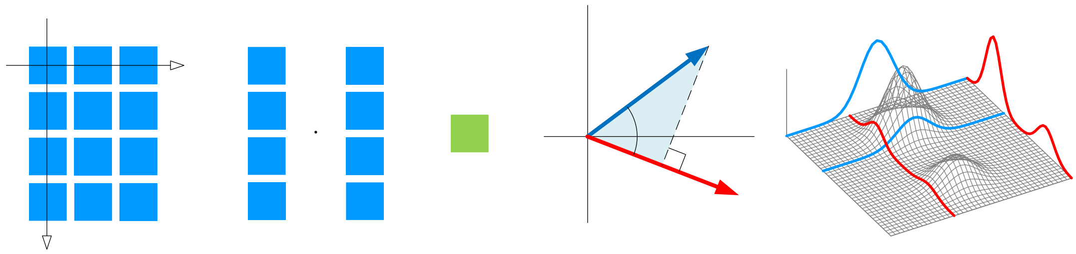


图 33. 总结本章重要内容的四副图

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。