

21

Fundamentals of Statistics

统计入门

以鸢尾花数据为例



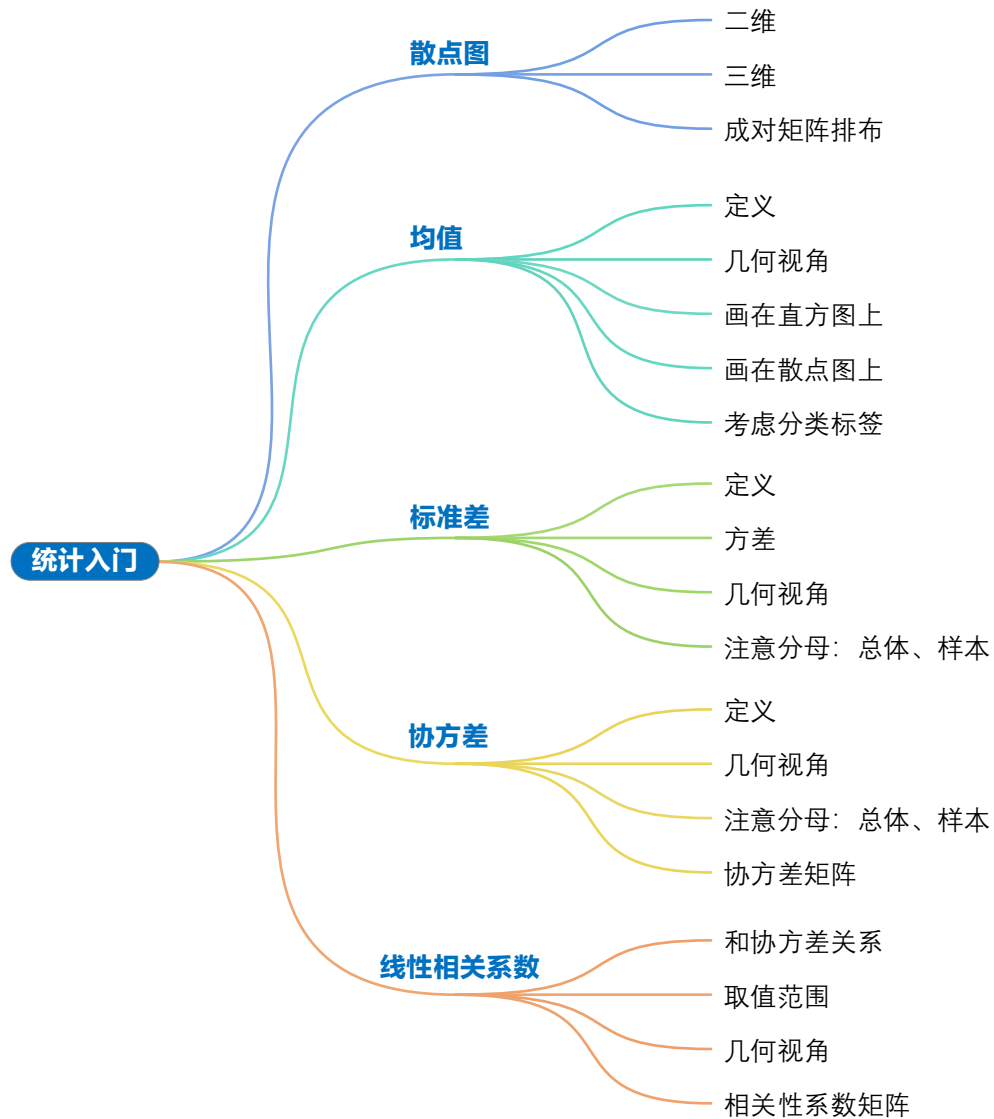
有朝一日，对于所有人，统计思维就像读写能力一样重要。

Statistical thinking will one day be as necessary for efficient citizenship as the ability to read and write.

—— 赫伯特·乔治·威尔斯 (H. G. Wells) | 英国科幻小说家 | 1866 ~ 1946



- ◀ `seaborn.heatmap()` 绘制热图
- ◀ `seaborn.histplot()` 绘制频率/概率直方图
- ◀ `seaborn.pairplot()` 绘制成对分析图
- ◀ `seaborn.lineplot()` 绘制线图



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

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

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

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

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

21.1 统计的前世今生：强国知十三数

现在，“概率”和“统计”两个词如影随形。统计搜集、整理、分析、研究数据，从而寻找规律。概率论是统计推断的基础。基于特定条件，概率量化事件的可能性。

现代统计学的主要数学基础是概率论；但是，统计的出现远早于概率。通过上一章学习，我们了解了概率出生草莽；但是，统计学却是衔玉而生。

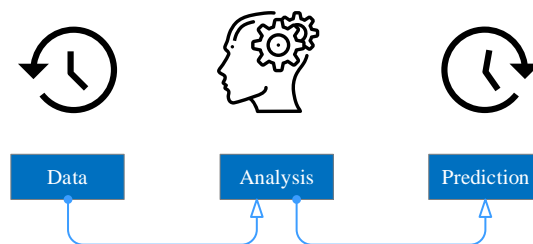


图 1. 统计和概率关系

统计学的初衷就是为国家管理提供可靠数据。英语中 statistics 是源于现代拉丁语 statisticum collegium (国会)。

战国思想家商鞅 (390 BC ~ 338 BC) 提出“强国知十三数”，他为秦国制定的统计内容包含“十三数”——“竟内仓、口之数，壮男、壮女之数，老、弱之数，官、士之数，以言说取食者之数，利民之数，马、牛、刍藁之数。欲强国，不知国十三数，地虽利，民虽众，国愈弱至削。”

简单说，商鞅认为和国家存亡攸关的统计数字包括粮仓、金库、壮年男子、壮年女子、老年人、体弱者、官吏、士卒、游说者、工商业者、牲畜和饲料。刍藁 (chú gǎo) 为饲养牲畜的草料。

商鞅强调统计数字对王朝兴亡至关重要。他说，“数者，臣主之术而国之要也。故万国失数而国不危，臣主失数而不乱者，未之有也。”大意是，统计数字是治国之术和国家根本；没有统计数字，君主便无法治国理政，国家就要危乱。

阿拉伯学者肯迪 (Al-Kindi, 801 ~ 873) 创作的《密码破译》(Manuscript on Deciphering Cryptographic Messages) 书中，介绍如何使用统计数据 and 频率分析进行密码破译。肯迪和本书前文介绍的**花拉子密** (Muhammad ibn Musa al-Khwarizmi) 都供职于巴格达“智慧宫 (House of Wisdom)”。

英国经济学家约翰·葛兰特 (John Graunt, 1620 ~ 1674) 在 1663 年发表了《对死亡率表的自然与政治观察》(Natural and Political Observations Made Upon the Bills of Mortality)，被誉为人口统计学的开山之作，他本人也常被称作“人口统计学之父”。

本章内容以鸢尾花数据为例，用最少的公式，尽量从几何可视化视角给大家介绍统计的入门知识。

21.2 散点图：当数据遇到坐标系

本书第 1 章以表格的形式介绍过鸢尾花数据。有了坐标系，类似鸢尾花这样的样本数据就可以在纸面飞跃。

本节介绍样本数据重要的可视化方案之一——**散点图** (scatter plot)。散点图将二维样本数据以点的形式展现在直角坐标系上。

图 2 (a) 所示为鸢尾花数据中花萼长度和花萼宽度两个特征的散点图。散点图中每一个点代表一朵鸢尾花，横坐标值代表花萼长度，纵坐标值代表花萼宽度。

我们知道鸢尾花数据集一共有 150 个数据点，分成 3 大类，也就是对应 3 个不同的标签。在图 2 (a) 散点图基础上，用不同颜色区分分类标签，我们可以得到图 2 (b)。

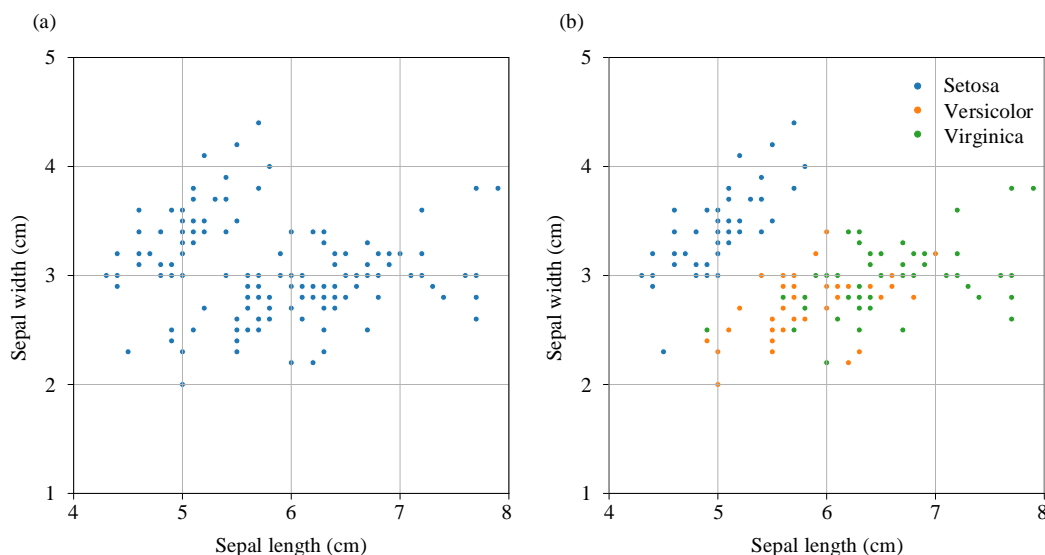


图 2. 花萼长度、花萼宽度特征数据散点图

我们也可以在三维直角坐标系中绘制散点图。图 3 (a) 所示为花萼长度、花萼宽度、花瓣长度三个特征的散点图。

在图 3 (a) 基础上，如果加上分类标签，我们可以得到图 3 (b)。

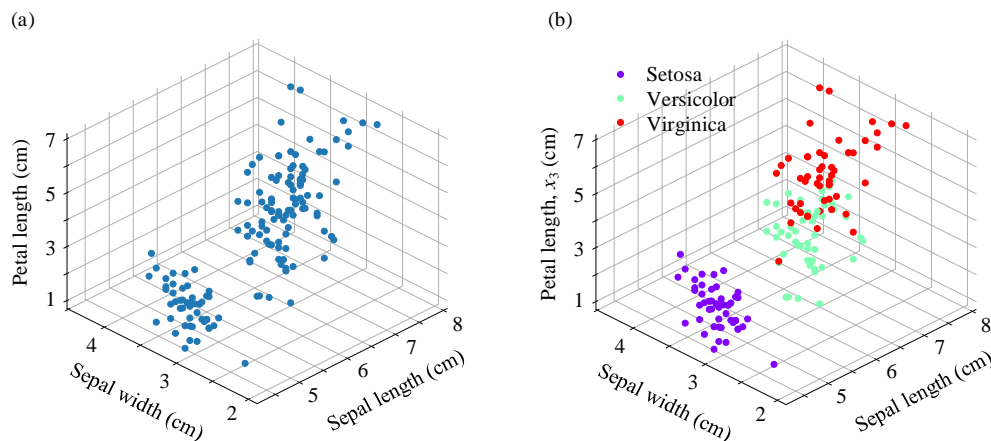


图 3. 花萼长度、花萼宽度、花瓣长度散点图

成对特征散点图

大家可能会问，鸢尾花有 4 个特征（花萼长度、花萼宽度、花瓣长度、花瓣宽度）；有没有什么可视化方案能够展示所有的特征？

答案是成对特征散点图。

如图 4 所示，16 幅子图被安排成 4×4 矩阵的形式。其中，12 幅散点图为成对特征关系，对角线上的 4 幅图像叫做**概率密度估计** (probability density estimation) 曲线。



简单来说，概率密度估计曲线展示数据分布情况，类似于上一章介绍的频率直方图。本系列丛书《概率统计》一册将专门讲解概率密度估计。

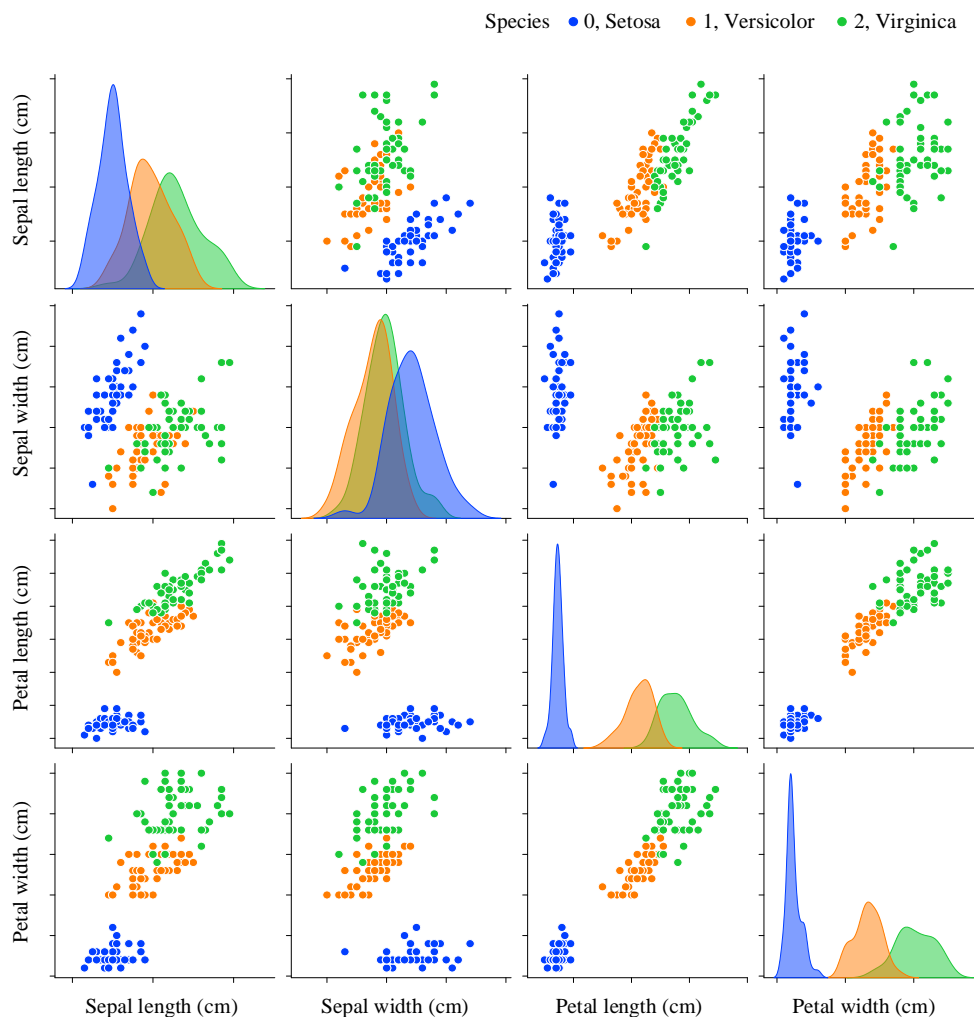


图 4. 鸢尾花数据成对特征散点图，考虑分类标签

散点图的作用

利用散点图，我们可以发现数据的集中、分布程度，比如数据主要集中在哪些区域。

散点图也会揭示不同特征之间可能存在的量化关系，比如图 4 中花瓣长度和宽度数据关系似乎能够用一条直线来表达。这就是**线性回归** (linear regression) 的思路。

此外，我们还可以利用散点图发现数据是否存在离群值。**离群值** (outlier) 指的是，和其他数据相比，数据中有一个或几个样本数值差异较大。



本系列丛书《数据科学》一册将讲解发现数据中离群值的常用算法。

本节采用可视化的方式来描绘数据，实际应用中，我们经常需要量化数据的集中、分散程度，以及不同特征之间的关系。这就需要大家了解均值、方差、标准差、协方差、相关性这些概念。这是本章后续要介绍的内容。



代码文件 Bk3_Ch21_1.py 中 Bk3_Ch21_1_A 部分绘制本节图像。

21.3 均值：集中程度

大家对均值这个概念应该不陌生。

均值 (average 或 mean)，也叫平均值，**算数平均数** (arithmetic average 或 arithmetic mean)。均值代表一组数据集中趋势。

均值对应的运算是，一组数据中所有数据先求和，再除以这组数据的个数。比如鸢尾花花萼特征数据 $\{x_1^{(1)}, x_1^{(2)}, \dots, x_1^{(150)}\}$ 有 150 个值，它们的平均值为：

$$\mu_1 = \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n x_1^{(i)} \right) = \frac{x_1^{(1)} + x_1^{(2)} + \dots + x_1^{(150)}}{150} \quad (1)$$

从几何角度，如图 5 所示，算数平均值相当于找到一个平衡点。

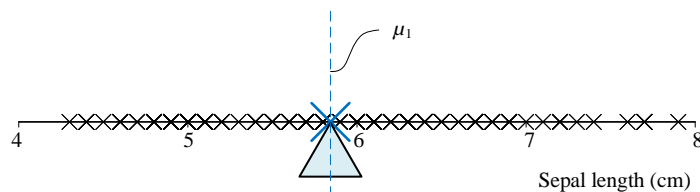


图 5. 均值相当于找到数据的平衡点

以鸢尾花为例，它的样本数据在花萼长度、花萼宽度、花瓣长度和花瓣宽度四个特征的均值分别为：

$$\mu_1 = 5.843, \mu_2 = 3.057, \mu_3 = 3.758, \mu_4 = 1.199 \quad (2)$$

图 6 所示为鸢尾花四个特征均值在频数直方图位置。

⚠ 注意在计算这四个均值时，我们并没有考虑鸢尾花的分类标签。

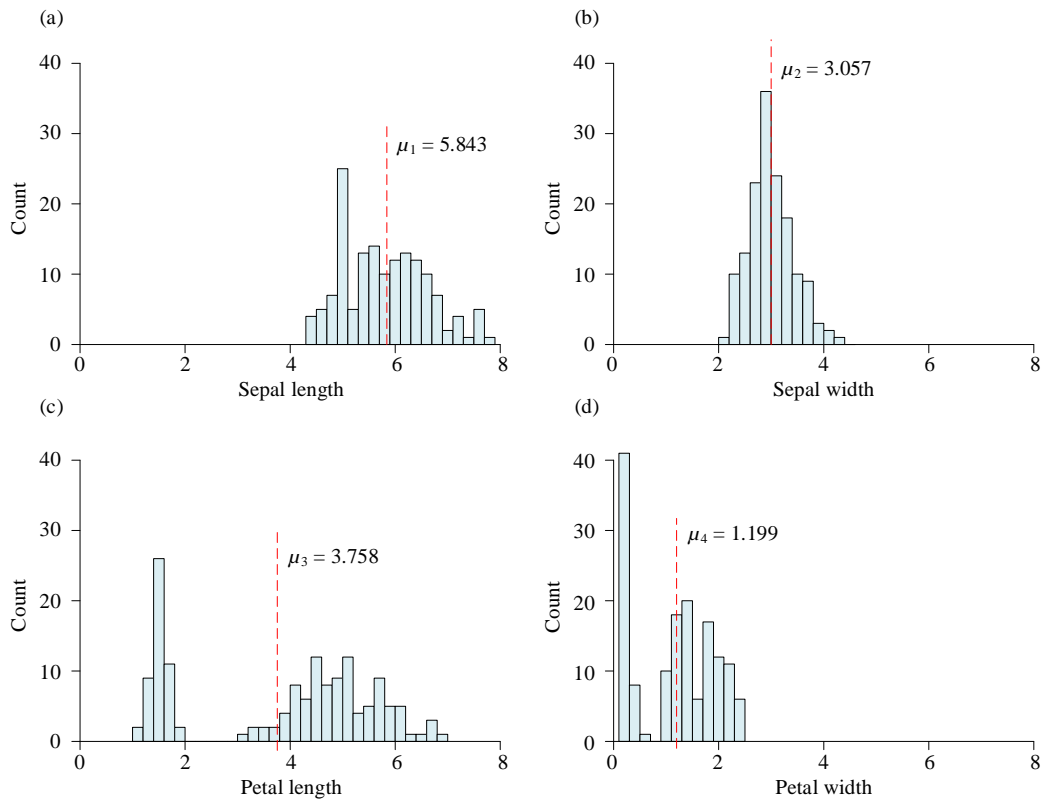


图 6. 鸢尾花四个特征数据均值在直方图位置

考虑分类

当然，我们在计算均值的时候，也可以考虑分类。

以鸢尾花数据为例，很多应用场合需要计算满足某个条件的均值，比如标签为 *virginica* 样本数据的花萼长度。

在图 4 基础上，我们可以三类不同标签条样本数据均值位置可视化，这样便得到图 7。图 7 中 ×、×、× 分别代表 *setosa*、*versicolor*、*virginica* 三个不同标签均值的位置。

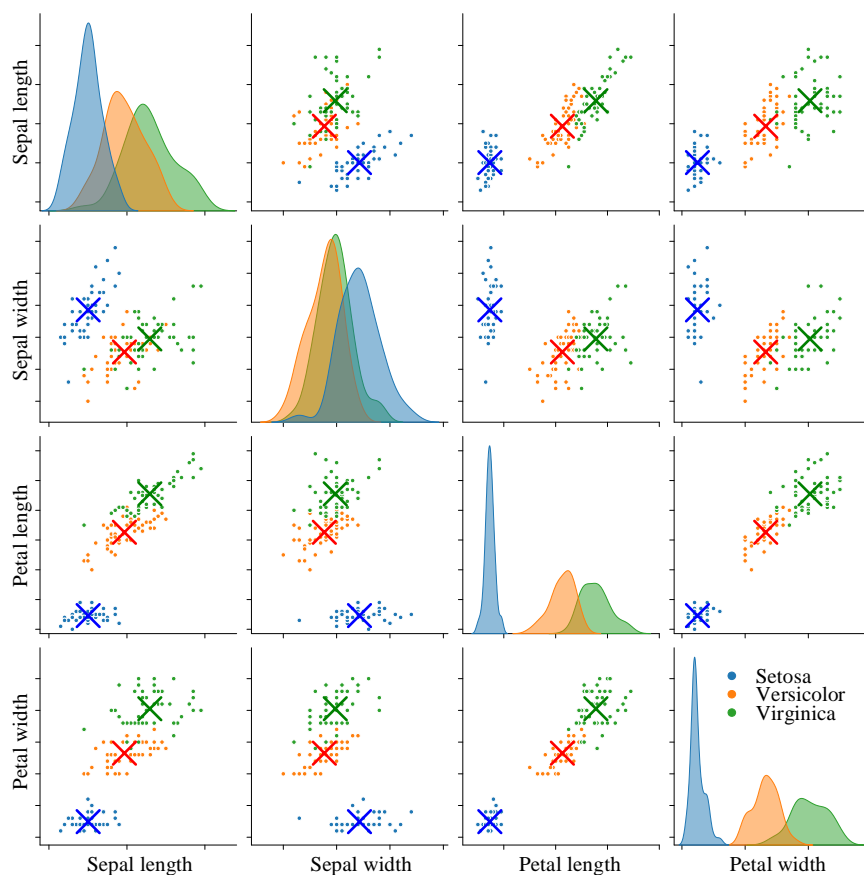


图 7. 均值在散点图上的位置，考虑分类标签



代码文件 Bk3_Ch21_1.py 中 Bk3_Ch21_1_B 部分计算均值并绘制图 6。

21.4 标准差：离散程度

标准差 (standard deviation) 描述一组数值以均值 μ 为基准的分散程度。如果数据为样本，比如鸢尾花花萼数据 $\{x_1^{(1)}, x_1^{(2)}, \dots, x_1^{(150)}\}$ 标准差为：

$$\sigma_1 = \sqrt{\frac{1}{150-1} \sum_{i=1}^{150} (x_1^{(i)} - \mu_1)^2} \quad (3)$$

⚠ 注意，(3) 根号内分式的分母为 $(150-1)$ ，不是 150。

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

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

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

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

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

标准差的平方为**方差** (variance):

$$\text{var}(X_1) = \sigma_1^2 = \frac{1}{150-1} \sum_{i=1}^{150} (x_1^{(i)} - \mu_1)^2 \quad (4)$$

如图 8 所示, $x_1^{(i)} - \mu_1$ 代表 $x_1^{(i)}$ 和 μ_1 距离; 而 $(x_1^{(i)} - \mu_1)^2$ 代表以 $|x_1^{(i)} - \mu_1|$ 为边长正方形的面积。
(4) 相当于这些正方形面积求平均值。

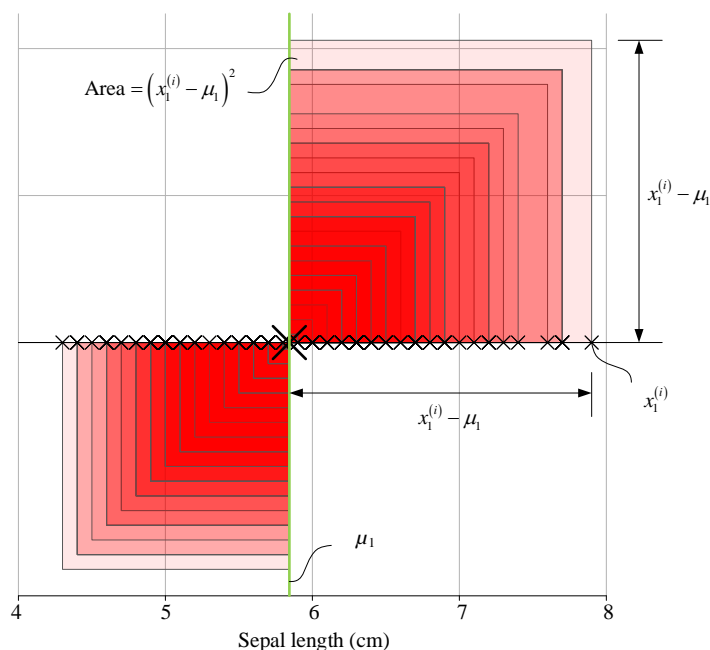


图 8. 几何视角看方差

⚠ 注意, 标准差的单位和样本数据相同; 但是, 方差的单位是样本数据单位的平方。比如, 鸢尾花花萼长度的单位是厘米 cm, 因此这个特征上样本数据的标准差对应的单位也是厘米 cm, 而方差的单位是平方厘米 cm^2 。所以在同一幅图上, 我们常会看到 μ 、 $\mu \pm \sigma$ 、 $\mu \pm 2\sigma$ 、 $\mu \pm 3\sigma$ 等。

计算鸢尾花样本数据四个特征的标准差:

$$\sigma_1 = 0.825, \sigma_2 = 0.434, \sigma_3 = 1.759, \sigma_4 = 0.759 \quad (5)$$

上式这些数值的单位都是厘米 cm。

图 9 所示为鸢尾花四个特征数据均值 μ 、标准差 $\mu \pm \sigma$ 在频数直方图位置。

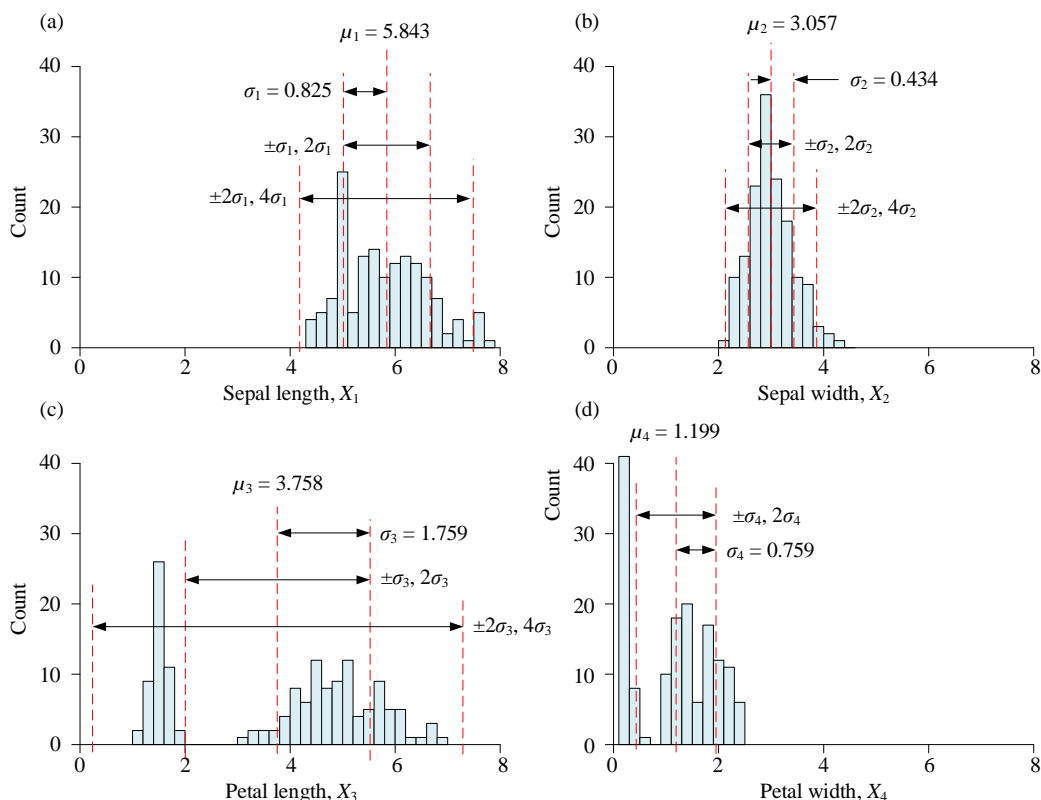


图 9. 鸢尾花四个特征数据均值、标准差在直方图位置



代码文件 Bk3_Ch21_1.py 中 Bk3_Ch21_1_C 部分计算标准差并绘制图 9。

21.5 协方差：联合变化程度

协方差 (covariance) 描述的是随机变量联合变化程度。白话讲，以图 4 中花瓣长度和宽度数据关系为例，我们发现如果样本数据的花瓣长度越长，其花瓣宽度很大可能也越宽。这就是联合变化。而协方差以量化的方式来定量分析这种联合变化程度。

定义第 i 朵花的花萼长度和花萼宽度的取值为 $(x_1^{(i)}, x_2^{(i)})$ ($i = 1, \dots, 150$)，花萼长度和宽度的协方差为：

$$\text{cov}(X_1, X_2) = \frac{1}{150-1} \sum_{i=1}^{150} (x_1^{(i)} - \mu_1)(x_2^{(i)} - \mu_2) \quad (6)$$

如图 10 所示，从几何视角， $(x_1^{(i)} - \mu_1)(x_2^{(i)} - \mu_2)$ 相当于以 $(x_1^{(i)} - \mu_1)$ 和 $(x_2^{(i)} - \mu_2)$ 为边的矩形面积。

▲ 注意这个面积有正负。

当 $(x_1^{(i)} - \mu_1)$ 和 $(x_2^{(i)} - \mu_2)$ 同号，面积为正，对应图 10 中红色矩形。也就是说，红色矩形越多说明，花萼长度越长，花萼宽度越宽；或者，花萼长度越短，花萼宽度越窄。

当 $(x_1^{(i)} - \mu_1)$ 和 $(x_2^{(i)} - \mu_2)$ 异号，面积为负，对应图 10 中蓝色矩形。蓝色矩形越多说明，花萼长度越长，花萼宽度越窄；花萼长度越短，花萼宽度越长。

这些矩形的面积的平均值便是协方差。同样在计算协方差时，对于样本，分母为 $n - 1$ ；对于总体，分母为 n 。

可以这样理解，当 X_1 和 X_2 联合变化越强，某个颜色 (红色或蓝色) 矩形面积之和越大；当 X_1 和 X_2 联合变化弱的时候，红色和蓝色矩形面积之和越趋向于 0，也就是颜色越“平衡”。

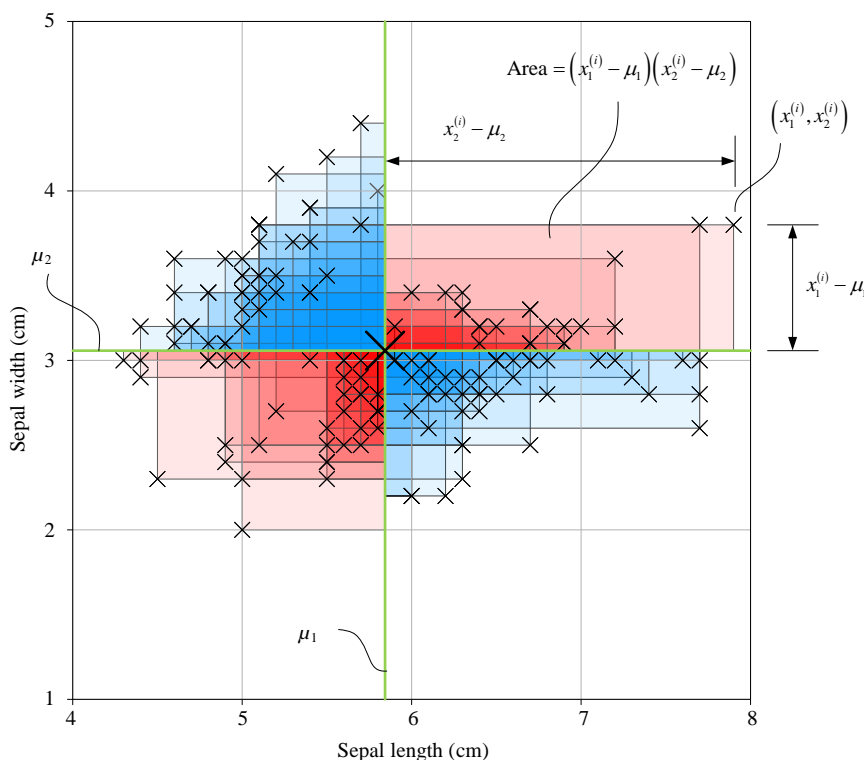


图 10. 几何视角看协方差

协方差矩阵

以鸢尾花为例，对于不同成对的特征，我们可以获得如下 6 (对应组合数 C_4^2) 个协方差值：

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

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

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

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

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

$$\begin{aligned}
\text{cov}(X_1, X_2) &= -0.042 \\
\text{cov}(X_1, X_3) &= 1.274 \\
\text{cov}(X_1, X_4) &= 0.516 \\
\text{cov}(X_2, X_3) &= -0.330 \\
\text{cov}(X_2, X_4) &= -0.122 \\
\text{cov}(X_3, X_4) &= 1.296
\end{aligned} \tag{7}$$

可以想象，如果我们有更多的特征，成对协方差值不计其数。整理和储存这些数据需要很好的结构。矩阵就是最好的解决办法。

由方差和协方差构成的矩阵叫做**协方差矩阵** (covariance matrix)，也叫方差-协方差矩阵 (variance-covariance matrix)。

以鸢尾花四个特征为例，这个协方差矩阵为 4×4 矩阵：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \text{cov}(X_1, X_1) & \text{cov}(X_1, X_2) & \text{cov}(X_1, X_3) & \text{cov}(X_1, X_4) \\ \text{cov}(X_2, X_1) & \text{cov}(X_2, X_2) & \text{cov}(X_2, X_3) & \text{cov}(X_2, X_4) \\ \text{cov}(X_3, X_1) & \text{cov}(X_3, X_2) & \text{cov}(X_3, X_3) & \text{cov}(X_3, X_4) \\ \text{cov}(X_4, X_1) & \text{cov}(X_4, X_2) & \text{cov}(X_4, X_3) & \text{cov}(X_4, X_4) \end{bmatrix} \tag{8}$$

协方差矩阵为方阵。矩阵中对角线上元素为方差。

也就是说，某个随机变量和自身求协方差，得到的就是方差，比如下例：

$$\text{cov}(X_i, X_i) = \text{var}(X_i) \tag{9}$$

协方差矩阵中非对角线上元素为协方差。容易知道，下式成立：

$$\text{cov}(X_i, X_j) = \text{cov}(X_j, X_i) \tag{10}$$

这就解释了为什么协方差矩阵为对称矩阵。

对于鸢尾花数据，它的协方差矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 具体值为：

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} 0.686 & -0.042 & 1.274 & 0.516 \\ -0.042 & 0.190 & -0.330 & -0.122 \\ 1.274 & -0.330 & 3.116 & 1.296 \\ 0.516 & -0.122 & 1.296 & 0.581 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow \text{Sepal length, } X_1 \\ \leftarrow \text{Sepal width, } X_2 \\ \leftarrow \text{Petal length, } X_3 \\ \leftarrow \text{Petal width, } X_4 \end{array} \tag{11}$$

图 14 所示为鸢尾花数据协方差矩阵热图。

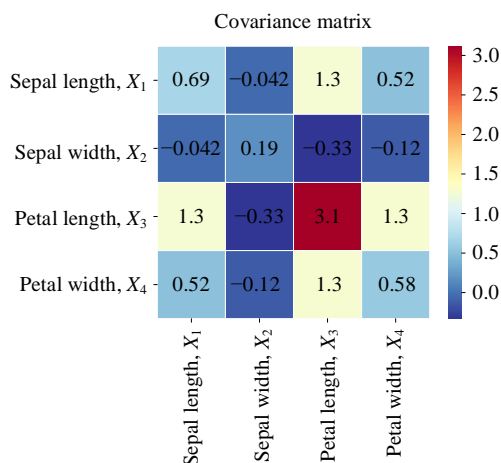


图 11. 鸢尾花数据协方差矩阵热图

考虑标签

当然，在计算协方差时，我们也可以考虑到数据标签。图 12 所示为三个不同标签数据各自的协方差矩阵热图。

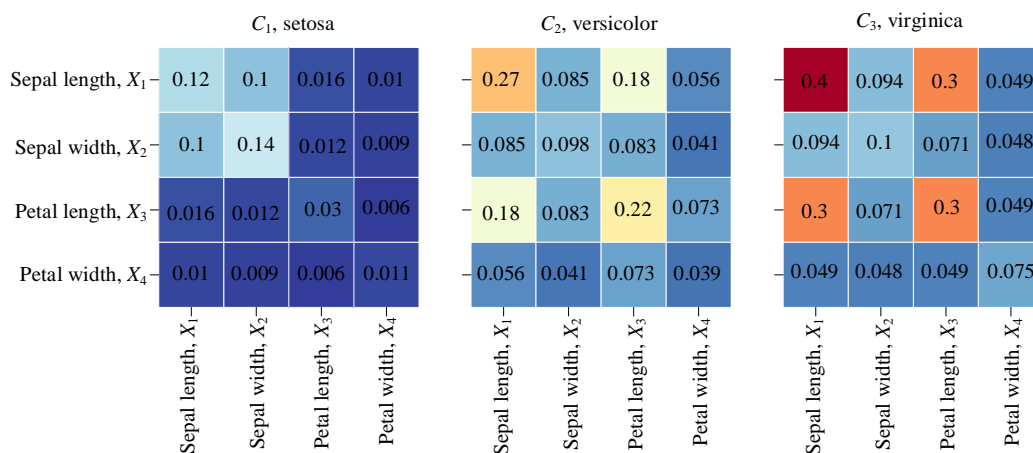


图 12. 协方差矩阵热图，考虑分类



代码文件 Bk3_Ch21_1.py 中 Bk3_Ch21_1_D 部分绘制本节热图。

21.6 线性相关性系数：线性关系强弱

有了上一节的协方差，我们就可以定义**线性相关性系数** (linear correlation coefficient 或 correlation coefficient)。线性相关性系数也叫**皮尔逊相关性系数** (Pearson correlation coefficient)，它刻画随机变量线性关系的强度，具体定义为：

$$\rho_{1,2} = \text{corr}(X_1, X_2) = \frac{\text{cov}(X_1, X_2)}{\sigma_1 \sigma_2} \quad (12)$$

ρ 的取值范围在 $[-1, 1]$ 。观察 (12)，可以发现 ρ 相当于协方差归一化。也相当于对两个随机变量的 z 分数求协方差：

$$\rho_{1,2} = \text{corr}(X_1, X_2) = \text{cov}\left(\frac{X_1 - \mu_1}{\sigma_1}, \frac{X_2 - \mu_2}{\sigma_2}\right) \quad (13)$$

归一化的线性相关性系数比协方差更适合横向比较。

采用和图 10 一样的几何视角，我们来看一下在不同相关性系数条件下，红色和蓝色矩形面积的特征。

如图 13 所示，当 $\rho = 0.9$ 时，矩形的颜色几乎都是红色；当 ρ 逐步减小到 0.3 时，红色矩形依然主导，但是蓝色矩形不断变多，也就是红蓝色趋向均衡。

相反，当 $\rho = -0.9$ 时，矩形的颜色中蓝色居多，而且面积和的比例明显压倒优势；当 ρ 逐步增大到 -0.3 时，红色矩形增多，面积增大。

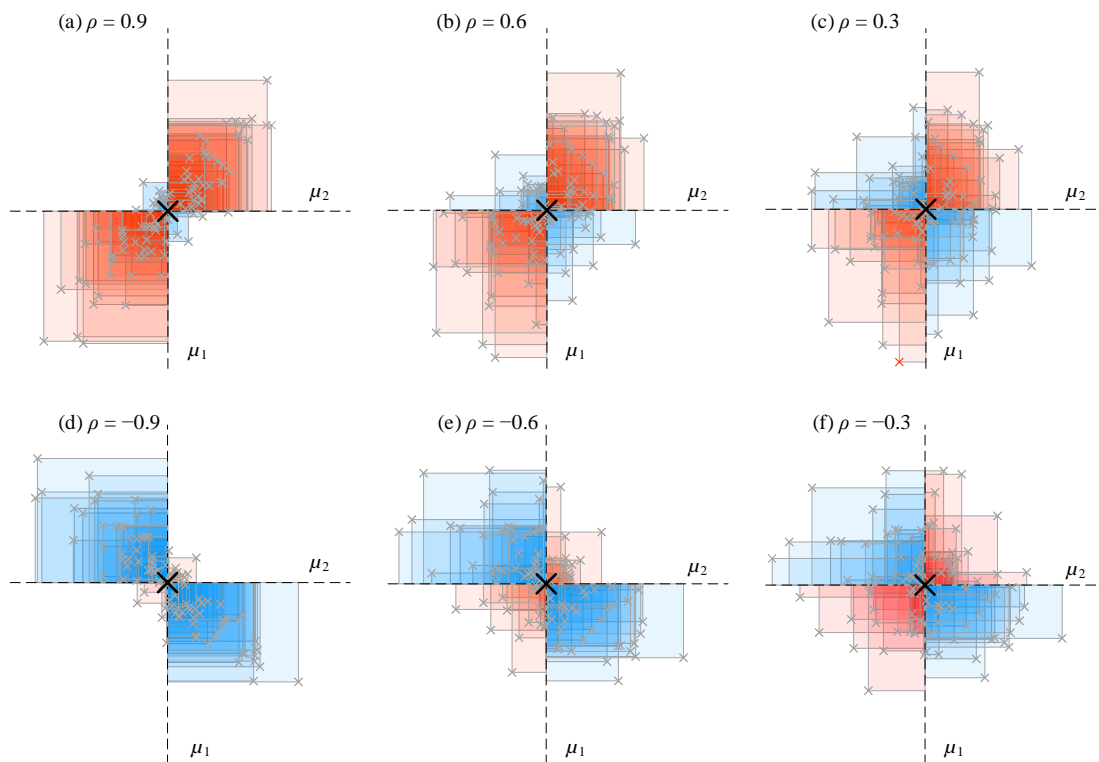


图 13. 几何视角看相关性系数

某个随机变量和自身求线性关系系数，结果为 1，比如下例：

$$\text{corr}(X_1, X_1) = \frac{\text{var}(X_1)}{\sigma_1 \sigma_1} = 1 \quad (14)$$

容易知道，下式成立：

$$\text{corr}(X_i, X_j) = \text{corr}(X_j, X_i) \quad (15)$$

相关性系数矩阵

类似上一节讲过的协方差矩阵，而相关性系数构成的矩阵叫做**相关性系数矩阵** (correlation matrix) \mathbf{P} ；以鸢尾花四个特征为例，其相关性系数矩阵为 4×4 ：

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & \rho_{1,2} & \rho_{1,3} & \rho_{1,4} \\ \rho_{2,1} & 1 & \rho_{2,3} & \rho_{2,4} \\ \rho_{3,1} & \rho_{3,2} & 1 & \rho_{3,4} \\ \rho_{4,1} & \rho_{4,2} & \rho_{4,3} & 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

线性相关性系数的主对角元素为 1，这是因为随机变量和自身的线性相关系数为 1；非对角线元素为成对相关系数。

鸢尾花数据的相关性系数矩阵 P 具体为：

$$P = \begin{bmatrix} 1.000 & -0.118 & 0.872 & 0.818 \\ -0.118 & 1.000 & -0.428 & -0.366 \\ 0.872 & -0.428 & 1.000 & 0.963 \\ 0.818 & -0.366 & 0.963 & 1.000 \end{bmatrix} \begin{matrix} \leftarrow \text{Sepal length, } X_1 \\ \leftarrow \text{Sepal width, } X_2 \\ \leftarrow \text{Petal length, } X_3 \\ \leftarrow \text{Petal width, } X_4 \end{matrix} \quad (17)$$

图 14 所示为 P 的热图。观察相关性系数矩阵 P ，可以发现花萼长度 X_1 和花萼宽度 X_2 线性负相关，花瓣长度 X_3 和花萼宽度 X_2 线性负相关，花瓣宽度 X_4 和花萼宽度 X_2 线性负相关。

当然，鸢尾花数据集样本数量有限，通过样本数据得出的结论远不足以推而广之。

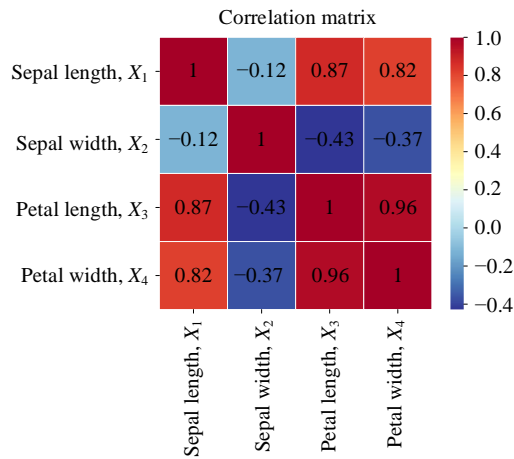


图 14. 鸢尾花数据相关性系数矩阵热图

考虑标签

图 15 为考虑分类标签条件下的协方差矩阵热图。

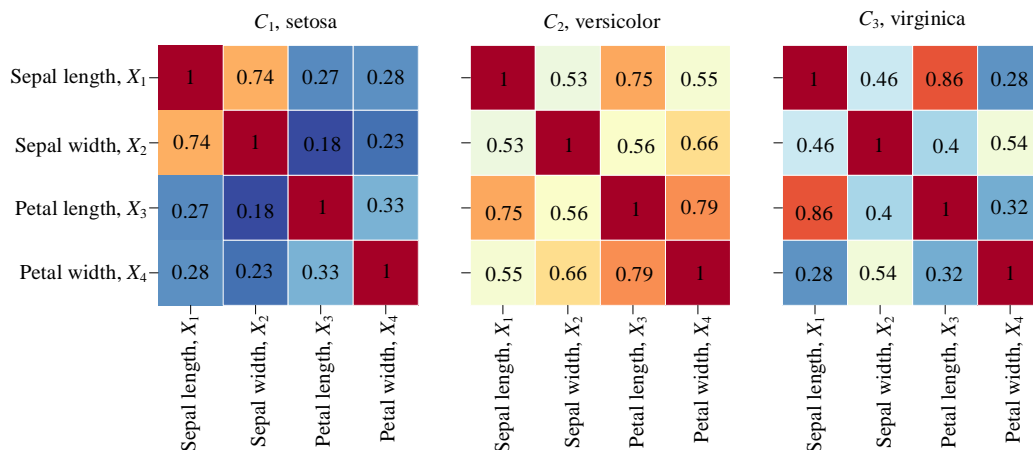


图 15. 相关性系数矩阵热图，考虑分类标签



代码文件 Bk3_Ch21_1.py 中 Bk3_Ch21_1_E 部分绘制本节热图。



在 Bk3_Ch21_1.py 基础上，我们做了一个 App 以鸢尾花数据为例展示如何用 Plotly 绘制具有交互性质的统计图像。请参考 Streamlit_Bk3_Ch21_1.py。



概率统计是数学中很大的一个版块，本书用两章的内容浮光掠影地介绍概率统计的入门知识，目的是让大家了解概率统计中重要概念，并建立它们和其他数学知识的联系。

概率统计，特别是多元概率统计，是数据科学和机器学习很多算法中重要的数学工具。本系列丛书将会在《概率统计》和大家系统探讨。