Preface



感谢

首先感谢大家的信任。

作者仅仅是在学习应用数学科学和机器学习算法时,多读了几本数学书,多做了些思考和知识整理而已。知者不言,言者不知。知者不博,博者不知。水平有限,把自己有限所学所思斗胆和大家分享,作者权当无知者无畏。希望大家在 B 站视频下方和 Github 多提意见,让这套书成为作者和读者共同参与创作的优质作品。

特别感谢清华大学出版社的栾大成老师。从选题策划、内容创作、装帧设计, 栾老师事无巨细、一路陪伴。每次和栾老师交流, 我都能感受到他对优质作品的追求、对知识分享的热情。

出来混总是要还的

曾几何时,考试是我们学习数学的唯一动力。考试是头悬梁的绳,是锥刺股的锥。我们中的绝大多数人从小到大为各种考试埋头题海,数学味同嚼蜡,甚至让人恨之入骨。

数学给我们带来了无尽的折磨。我们憎恨数学,恐惧数学,恨不得一走出校门就把数学抛之脑后、 老死不相往来。

可悲可笑的是,我们其中很多人可能会在毕业的五年或十年以后,因为工作需要,不得不重新学习 微积分、线性代数、概率统计,悔恨当初没有学好数学、走了很多弯路、没能学以致用,从而迁怒于教 材和老师。

这一切不能都怪数学,值得反思的是我们学习数学的方法、目的。

再给自己一个学数学的理由

为考试而学数学,是被逼无奈的举动。而为数学而数学,则又太过高尚而遥不可及。

相信对于绝大部分的我们来说,数学是工具、是谋生手段,而不是目的。我们主动学数学,是想用数学工具解决具体问题。

现在,这套书给大家一个"学数学、用数学"的全新动力——数据科学、机器学习。

数据科学和机器学习已经深度融合到我们生活的方方面面,而数学正是开启未来大门的钥匙。不是所有人生来都握有一副好牌,但是掌握"数学+编程+机器学习"绝对是王牌。这次,学习数学不再是为了考试、分数、升学,而是投资时间、自我实现、面向未来。

未来已来, 你来不来?

本套丛书如何帮到你

为了让大家学数学、用数学,甚至爱上数学,作者可谓颇费心机。在创作这套书时,作者尽量克服 传统数学教材的各种弊端,让大家学习时有兴趣、看得懂、有思考、更自信、用得着。

为此, 丛书在内容创作上突出以下几个特点:

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

- **数学** + **艺术**——全彩图解,极致可视化,让数学思想跃然纸上、生动有趣、一看就懂,同时提高大家的数据思维、几何想象力、艺术感;
- ▼ **零基础**——从零开始学习 Python 编程,从写第一行代码到搭建数据科学和机器学习应用;
- 知识网络——打破数学板块之间的壁垒,让大家看到数学代数、几何、线性代数、微积分、概率统计等板块之间的联系、编织一张绵密的数学知识网络;
- 动手——授人以鱼不如授人以渔、和大家一起写代码、用 Streamlit 创作数学动画、交互 App;
- ◆ 学习生态——构造自主探究式学习生态环境"微课视频 + 纸质图书 + 电子图书 + 代码文件 + 可视化工具 + 思维导图",提供各种优质学习资源;
- **理论** + **实践**——从加减乘除到机器学习,丛书内容安排由浅入深、螺旋上升,兼顾理论和实践;在编程中学习数学,学习数学时解决实际问题。

虽然本书标榜"从加减乘除到机器学习",但是建议读者朋友们至少具备高中数学知识。如果读者正在学习或曾经学过大学数学(微积分、线性代数、概率统计),这套书就更容易读了。

聊聊数学

数学是工具。锤子是工具,剪刀是工具,数学也是工具。

数学是思想。数学是人类思想的高度抽象的结晶体。在其冷酷的外表之下,数学的内核实际上就是人类朴素的思想。学习数学时,知其然,更要知其所以然。不要死记硬背公式定理,理解背后的数学思想才是关键。如果你能画一幅图、用大白话描述清楚一个公式、一则定理,这就说明你真正理解了它。

数学是语言。就好比世界各地不同种族有自己的语言,数学则是人类共同的语言和逻辑。数学这门语言极其精准、高度抽象,放之四海而皆准。虽然我们中绝大多数人没有被数学女神选中,不能为人类的对数学认知开疆扩土;但是,这丝毫不妨碍我们使用数学这门语言。就好比,我们不会成为语言学家,我们完全可以使用母语和外语交流。

数学是体系。代数、几何、线性代数、微积分、概率统计、优化方法等等,看似一个个孤岛,实际上都是数学网络的一条条织线。建议大家学习时,特别关注不同数学板块之间的联系,见树,更要见林。

数学是基石。拿破仑曾说"数学的日臻完善和这个国强民富息息相关。"数学是科学进步的根基,是经济繁荣的支柱,是保家卫国的武器,是探索星辰大海的航船。

数学是艺术。数学和音乐、绘画、建筑一样,都是人类艺术体验。通过可视化工具,我们会在看似 枯燥的公式、定理、数据背后,发现数学之美。

数学是历史,是人类共同记忆体。"历史是过去,又属于现在,同时在指引未来。"数学是人类的集体学习思考,她把人的思维符号化、形式化,进而记录、积累、传播、创新、发展。从甲骨、泥板、石板、竹简、木牍、纸草、羊皮卷、活字印刷、纸质书,到数字媒介,这一过程持续了数千年,至今绵延不息。

数学是无穷无尽的**想象力**,是人类的**好奇心**,是自我挑战的**毅力**,是一个接着一个的**问题**,是看似 荒诞不经的**猜想**,是一次次胆大包天的**批判性思考**,是敢于站在前人的臂膀之上的**勇气**,是孜孜不倦地 延展人类认知边界的**不懈努力**。

家园、诗、远方

诺瓦利斯曾说:"哲学就是怀着一种乡愁的冲动到处去寻找家园。"

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

在纷繁复杂的尘世,数学纯粹的就像精神的世外桃源。数学是,一束光,一条巷,一团不灭的希望,一股磅礴的力量,一个值得寄托的避风港。

打破陈腐的锁链,把功利心暂放一边,我们一道怀揣一分乡愁、心存些许诗意、踩着艺术维度,投入数学张开的臂膀,驶入她色彩斑斓、变幻无穷的深港,感受久违的归属,一睹更美、更好的远方。

Acknowledgement



To my parents.

谨以此书献给我的母亲父亲

How to Use the Book

使用本书

丛书资源

本系列丛书提供的配套资源有以下几个:

- ◀ 纸质图书;
- ◆ PDF 文件,方便移动终端学习;请大家注意,纸质图书经过出版社五审五校修改,内容细节上会和 PDF 文件有出入。
- ◆ 每章提供思维导图、纸质书提供全书思维导图海报;
- ▼ Python 代码文件,直接下载运行,或者复制、粘贴到 Jupyter 运行;
- ▼ Python 代码中有专门用 Streamlit 开发数学动画和交互 App 的文件;
- ◀ 微课视频、强调重点、讲解难点、聊聊天。

在纸质书中为了方便大家查找不同配套资源,作者特别设计了如下几个标识。



微课视频

本书配套微课视频均发布在B站——生姜 DrGinger:

https://space.bilibili.com/513194466

微课视频是以"聊天"的方式,和大家探讨某个数学话题的重点内容,讲讲代码中可能遇到的难点, 甚至侃侃历史、说说时事、聊聊生活。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便读者在移动终端学习,终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。版权归清华大学出版社所有,请勿商用,引用请注明出处。 代码及 PDF 文件下载: https://github.com/Visualize-ML 本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466 欢迎大家批评指教,本书专属邮箱: jiang.visualize.ml@gmail.com 本书配套的微课视频目的是引导大家自主编程实践、探究式学习,并不是"照本宣科"。

纸质图书上已经写得很清楚的内容,视频课程只会强调重点。需要说明的是,图书内容不是视频的 "逐字稿"。

代码文件

本系列丛书的 Python 代码文件下载地址为:

https://github.com/Visualize-ML

Python 代码文件会不定期修改,请大家注意更新。图书配套的 PDF 文件和勘误也会上传到这个 GitHub 账户。因此,建议大家注册 GitHub 账户,给书稿文件夹标星 (star) 或分支克隆 (fork)。

考虑再三,作者还是决定不把代码全文印在纸质书中,以便减少篇幅,节约用纸。

本书编程实践例子中主要使用"鸢尾花数据集",数据来源是 Scikit-learn 库、Seaborn 库。此外,系列 丛书封面设计致敬梵高《鸢尾花》,要是给本系列丛书起个昵称的话,作者乐见"鸢尾花书"。

App 开发

本书几乎每一章都至少有一个用 Streamlit 开发的 App,用来展示数学动画、数据分析、机器学习算 法。

Streamlit 是个开源的 Python 库,能够方便快捷搭建、部署交互型网页 App。Streamlit 非常简单易 用、很受欢迎。Streamlit 兼容目前主流的 Python 数据分析库,比如 NumPy、Pandas、Scikit-learn、 PyTorch、TensorFlow 等等。Streamlit 还支持 Plotly、Bokeh、Altair 等交互可视化库。

本书中很多 App 设计都采用 Streamlit + Plotly 方案。此外,本书专门配套教学视频手把手和大家一 起做 App。

大家可以参考如下页面, 更多了解 Streamlit:

- https://streamlit.io/gallery
- https://docs.streamlit.io/library/api-reference

实践平台

本书作者编写代码时采用的 IDE (integrated development environment) 是 Spyder,目的是给大家提供 简洁的 Python 代码文件。

但是,建议大家采用 JupyterLab 或 Jupyter notebook 作为本系列丛书配套学习工具。

简单来说,Jupyter 集合"浏览器 + 编程 + 文档 + 绘图 + 多媒体 + 发布"众多功能与一身,非常适合探 究式学习。

运行 Jupyter 无需 IDE,只需要浏览器。Jupyter 容易分块执行代码。Jupyter 支持 inline 打印结果,直 接将结果图片打印在分块代码下方。Jupyter 还支持很多其他语言,比如 R 和 Julia。

使用 markdown 文档编辑功能,可以编程同时写笔记,不需要额外创建文档。Jupyter 中插入图片和 视频链接都很方便。此外,还可以插入 Latex 公式。对于长文档,可以用边栏目录查找特定内容。

Jupyter 发布功能很友好,方便打印成 HTML、PDF 等格式文件。

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

Jupyter 也并不完美,目前尚待解决的问题有几个。Jupyter 中代码调试不方便,需要安装专门插件 (比如 debugger)。Jupyter 没有 variable explorer,要么 inline 打印数据,要么将数据写到 csv 或 Excel 文件中再打开。图像结果不具有交互性,比如不能查看某个点的值,或者旋转 3D 图形,可以考虑安装 (jupyter-matplotlib)。注意,利用 Altair 或 Plotly 绘制的图像支持交互功能。对于自定义函数,目前没有快捷键直接跳转到其定义。但是,很多开发者针对这些问题都开发了插件,请大家留意。

大家可以下载安装 Anaconda,JupyterLab、Spyder、PyCharm 等常用工具都集成在 Anaconda 中。下载 Anaconda 的地址为:

https://www.anaconda.com/

学习步骤

大家可以根据自己的偏好制定学习步骤,本书推荐如下步骤。



学完每章后,大家可以在平台上发布自己的 Jupyter 笔记,进一步听取朋友们的意见,共同进步。 这样做还可以提高自己学习的动力。

意见建议

欢迎大家对本系列丛书提意见和建议, 丛书专属邮箱地址为:

◀ jiang.visualize.ml@gmail.com

也欢迎大家在B站视频下方留言互动。

Contents





Introduction

绪论

图解+编程+实践+数学板块融合

0.1 本册在鸢尾花书的定位

首先祝贺大家完成"数学"板块的学习,同时欢迎大家来到鸢尾花书第三板块——实践。

"实践"这个板块,我们将会把学到的编程、可视化,特别是数学工具应用到具体的数据科学、机器学习算法中,并在实践中加深对这些工具的理解。

"实践"这个板块有两本书:《数据有道》、《机器学习》。

《数据有道》则以数据为视角,展开讲解的话题包括数据处理、时间数据、图与网络。图与网络是本册的一道"大菜",占据超过一半的篇幅。

《机器学习》则着重介绍机器学习中最经典的四大类算法——回归、分类、降维、聚类。

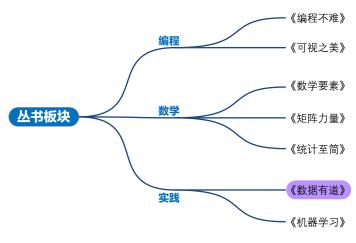


图 1. 鸢尾花书板块布局

0.2 结构: 6 大板块

《数据有道》可以归纳为 6 大板块——数据说、数据处理、时间数据、图论基础、图的分析、图与 矩阵、图论实践。这 6 个板块都紧紧围绕一个主题——数据!

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

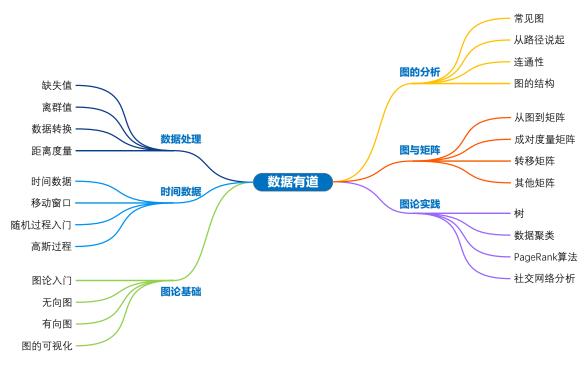


图 2. 《数据有道》板块布局

本书第1章不属于上述任何一个板块,这章相当于是本册"综述",和大家鸟瞰数学、数据和机器学习算法之间的联系。

数据处理

这个板块主要介绍机器学习中的常见数据处理工具。

- 第2章讲解如何处理数据中的缺失值。
- 第3章介绍处理离群值的常用工具,这一章和机器学习算法联系紧密。

第 4 章讲解常用数据转换方法,本章也相当于对统计知识的回顾;这章还特别介绍插值,请大家特别注意插值和回归的区别;另外,请大家注意《可视之美》中介绍的贝塞尔曲线和插值的联系。

第5章介绍数据距离,机器学习算法几乎都离不开距离度量。而距离度量丰富多彩,本章带大家回顾各种距离度量。特别地,这章还要从距离角度再聊协方差矩阵。鸢尾花书一而再再而三不厌其烦地从各个角度讲解协方差矩阵,这是因为协方差矩阵在机器学习算法中扮演太重要的角色。

时间数据

这个板块介绍一类特殊数据——具有时间戳的数据,也叫时间序列。

第6章讲解如何处理时间数据、发现数据的趋势、时间序列分解等内容。时间数据的特征随时间动态变化。

第7章中,大家会看到均值、标准差(波动率)、相关性系数、回归系数、协方差矩阵都可以随移动窗口变化。此外,移动窗口内的数据权重也可以有变化,比如指数加权移动平均 EWMA。

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

第8章是随机过程入门,介绍布朗运动、几何布朗运动,以及用几何布朗运动完成股价走势的蒙特卡罗模拟。这一章是《统计至简》第15章的延伸。

第9章介绍高斯过程。高斯过程可谓高斯分布、贝叶斯定理的集大成者。这一章相对来说难度较高,需要大家下一点功夫理解。《机器学习》还会介绍高斯过程,并且介绍如何用 Scikit-learn 中高斯过程工具完成回归和分类。

本书最后四个板块都和图论有关。可以说,图是一种特别有趣的数据结构。而且,阅读这部分内容,大家会发现,图就是矩阵,矩阵就是图。这 16 章内容都会采用 NetworkX 库创作各种和理论紧密结合的实操实例,希望大家边学边练。

图论基础

第10章主要介绍了图论当中的无向图、有向图及相关概念,大家会发现其实图和网络无处不在。

第11章专门介绍无向图;第12章则讲解有向图。这两章结构类似,建议平行对比来读。

第13章讲解如何用NetworkX绘制图,特别是对节点、边、标注等元素的修饰。

图的分析

第 14 章结合 NetworkX 介绍图论中常见的几种图及特性。这章中的柏拉图图相当于《数学要素》中介绍的柏拉图立体的扩展。

第15章介绍了与路径有关的常见概念,并介绍了常见路径问题。

第 16 章介绍连通性。在图论中,连通性用来分析图中节点之间路径相互连接关系。它用于研究图的整体结构和网络中信息的传递,对于解决网络设计、路径规划等问题具有重要意义。请大家特别注意连通、不连通、连通图、非连通图、连通分量、桥、局部桥这几个概念。

第 17 章是这个板块比较有难度的一章;这章介绍了度分析、图距离、中心性、社区这四个网络分析中常用的概念。特别在本书最后一章讲解社交网络分析时,将会大量使用本章概念。

图与矩阵

这个板块很有意思——把图和矩阵紧密联系在了一起。

图就是矩阵,矩阵就是图,这一点值得反复强调。

第 18 章主要介绍邻接矩阵和图之间的关系;这章还介绍了另外一种中心性度量——特征向量中心度。

第 19 章专门介绍了成对度量矩阵都可以看做是图。常见的成对度量矩阵有欧氏距离矩阵、相似度 矩阵、协方差矩阵、相关系系数矩阵。它们都可以看做是特殊的邻接矩阵,也就对应不同的图。

第 20 章则把有向图、邻接矩阵、转移矩阵联系在一起,并引出了马尔科夫链;这实际上是**《**数学要素》中"鸡兔互变"的扩展。

第 21 章介绍更多和图有关的矩阵,比如关联矩阵、度矩阵、拉普拉斯矩阵等等;这一章会回顾特征值分解,然后介绍图论中特征值分解(特别是谱分解)的应用。

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

这4章也和大家一起回顾了《矩阵力量》介绍的重要线性代数工具。

图论实践

本书最后一个板块则是图论实践,一共设置了 4 个话题——树 (第 22 章)、数据聚类 (第 23 章)、 PageRank 算法 (第 24 章)、社交网络分析 (第 25 章)。

第 22 章介绍树这种特殊的图;这一章还会涉及到决策树 (分类算法)、层次聚类 (聚类算法),这是 《机器学习》要展开讲解的两种重要算法。

第23章主要介绍谱聚类,一种基于图论的聚类算法;《机器学习》还会简单介绍这种算法。

第24章介绍的PageRank算法、拉普拉斯矩阵、特征值分解、马尔科夫链等概念有着密切关系。

第 25 章讲解社交网络分析。社交网络分析是网络结构的方法,通过分析个体 (节点) 之间的关系 (边) 来揭示信息流动、影响力分布和群体结构。本章大量用到本书第 16、17 章介绍的概念。

0.3 特点: 以好奇心为驱动力

鸢尾花书前五本书分别介绍了编程、可视化、数学、线性代数、概率统计这五个板块。虽然每本书 穿插了很多应用案例,但是"工具"还是"主","应用"则是"宾"。

打个比方, 前五本书好像唠唠叨叨在告诉大家"认真读, 好好学, 这些编程工具、可视化工具、数学工具以后有大用途。"

这可能也是课堂"被动"教学的弊端,包括数学在内的课堂学习都是发生在我们的实际生活、工作、探索世界的"需求"之前。先学着,好好学,以后可能用得着。至于什么时候用,怎么用,这都不是现在要操心的事情。

以奇异值分解为例,在《编程不难》中,我们仅仅介绍了 NumPy 中完成奇异值分解的 Python 函数。《可视之美》则利用几何变换展示奇异值分解背后的数学之美。而《矩阵力量》则花了两章内容专门讲解这个奇异值分解这个数据工具,然后又利用奇异值分解介绍了四个空间。

而《数据有道》试图做的就是逆转这种被动的"主宾"关系,以数据为名,以好奇心和疑问为驱动, 主动探索使用"编程 + 可视化 + 数学"工具。

在《数据有道》中我们将会回顾鸢尾花书前五本主要的"编程 + 可视化 + 数学"工具,让大家对很多概念从似懂非懂变成如数家珍;同时,我们还会掌握更多工具,扩展大家的知识网络。

至于《数据有道》是否成功实现了这些目标,就要看大家阅读后学习体验了,希望本册不会辜负大家期待。