3 Vector Norm 向量范数

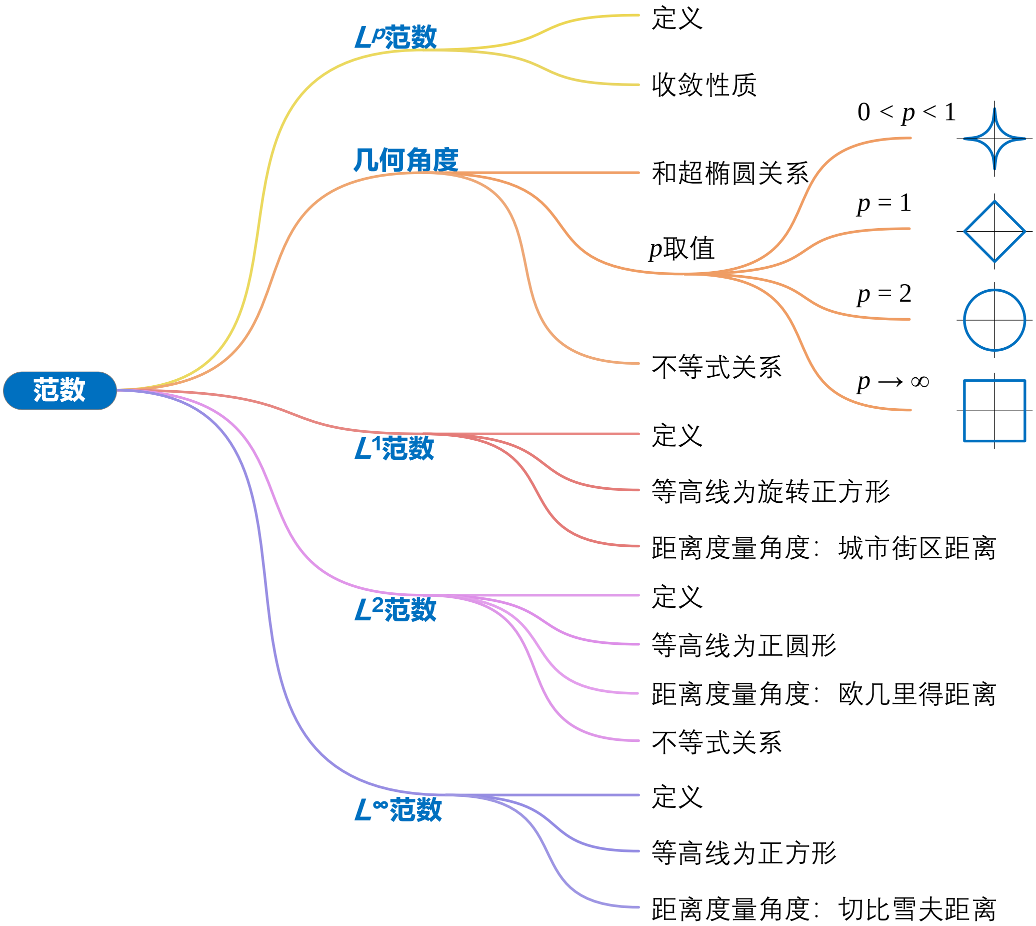
欧几里得距离的延伸

数学领域，理解不了的概念不要紧，用习惯就好了。

In mathematics, you don't understand things. You just get used to them.

—— 约翰·冯·诺伊曼 (Johann von Neumann) | 理论计算机科学与博弈论奠基者 | 1903 ~ 1957

- ◀ `matplotlib.pyplot.axhline()` 绘制水平线
- ◀ `matplotlib.pyplot.axvline()` 绘制竖直线
- ◀ `matplotlib.pyplot.contour()` 绘制等高线图
- ◀ `matplotlib.pyplot.contourf()` 绘制填充等高线图
- ◀ `numpy.abs()` 计算绝对值
- ◀ `numpy.linalg.norm()` 默认计算 Lp 范数
- ◀ `numpy.linsapce()` 指定的间隔内返回均匀间隔的数字
- ◀ `numpy.maximum()` 计算最大值
- ◀ `numpy.meshgrid()` 生成网格化数据


范数
L^p范数
定义
收敛性质
几何角度
和超椭圆关系
p取值
$0 < p < 1$
$p = 1$
$p = 2$
$p \to \infty$
不等式关系
L^1范数
定义
等高线为旋转正方形
距离度量角度：城市街区距离
L^2范数
定义
等高线为正圆形
距离度量角度：欧几里得距离
不等式关系
L^∞范数
定义
等高线为正方形
距离度量角度：切比雪夫距离

3.1 L^p范数：L^2范数的推广

本书前文介绍了 L^2 范数，本章将其推广到 L^p 范数。

给定如下 D 维列向量 $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_D \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{1}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^p 范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_D|^p\right)^{1/p} = \left(\sum_{i=1}^{D} |x_i|^p\right)^{1/p} \tag{2}$$

一般情况，p 取不同正数。注意，式中 $|x_i|$ 计算 x_i 的绝对值。另外，很多教材将 L^p 范数记做，Lp 范数，或 p-范数。

向量 $\boldsymbol{x}$ 的模便是 **L^2 范数** (L2-norm)，也叫 2-范数、欧几里得距离，定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_D^2} = \left(\sum_{i=1}^{D} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3}$$

(3) 中 $\|\boldsymbol{x}\|_2$ 的下角标常被省略，也就是说 $\|\boldsymbol{x}\|$ 常被默认为 L^2 范数。

特别地，当 p 为$+\infty$时，对应的范数记成 L^∞。L^∞范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_D|\right) \tag{4}$$

即，$\|\boldsymbol{x}\|_\infty$ 为 $|x_i|$ 中的最大值。

大小关系

举个例子，如图 1 所示，给定向量 $\boldsymbol{x}$：

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{5}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^1 范数是图 1 中三个坐标值的绝对值之和，也就是图 1 长方体边长之和：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = |1| + |2| + |3| = 6 \tag{6}$$

L^2 范数是图 1 向量 $\boldsymbol{x}$ 的长度：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \left(|1|^2 + |2|^2 + |3|^2\right)^{1/2} = (14)^{1/2} \approx 3.742 \tag{7}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^3 范数，可以通过下式求得：

$$\|\boldsymbol{x}\|_3 = \left(|1|^3 + |2|^3 + |3|^3\right)^{1/3} = 36^{1/3} \approx 3.302 \tag{8}$$

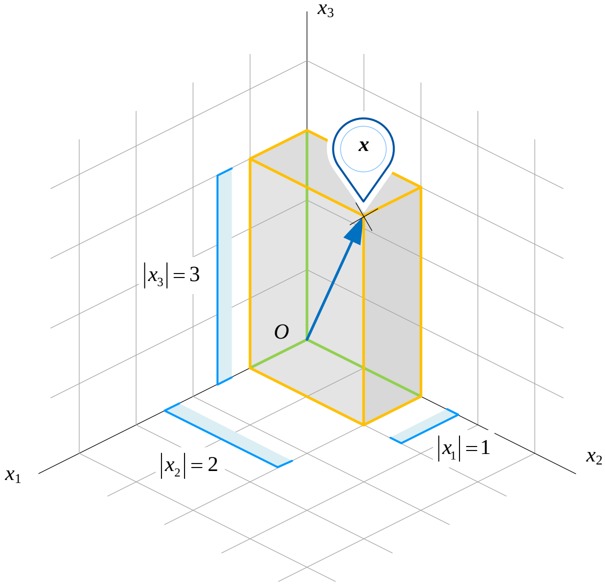


图 1. 向量 $\boldsymbol{x}$ 在三维直角坐标系的位置

类似地，计算向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^4 范数：

$$\|\boldsymbol{x}\|_4 = \left(|1|^4 + |2|^4 + |3|^4\right)^{1/4} = 98^{1/4} \approx 3.1463 \tag{9}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^∞ 范数是图 1 中 x_1、x_2、x_3 三者绝对值中最大值：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|1|, |2|, |3|\right) = 3 \tag{10}$$

图 2 所示图像为 L^p 范数随 p 变化。对于 $\boldsymbol{x} = [1, 2, 3]^{\mathrm{T}}$，$L^p$ 范数随 p 增大而减小，最后收敛于 3。

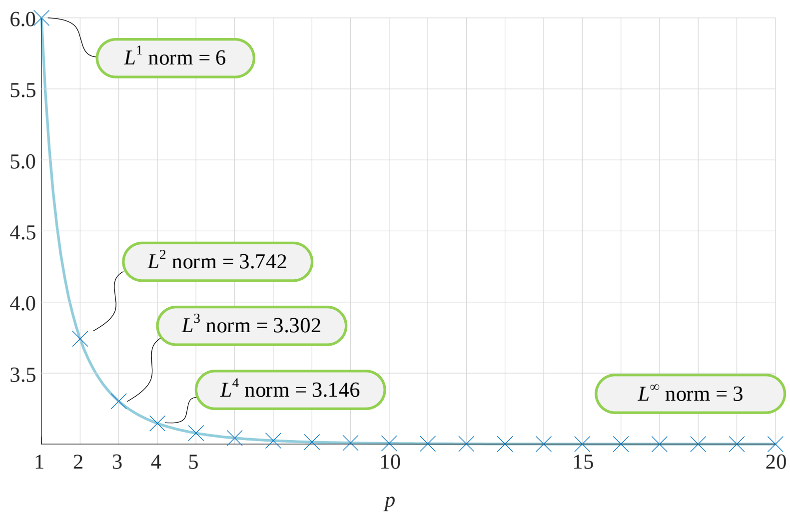


图 2. L^p 范数随 p 变化

下一节，我们就从几何图像入手，深入分析 L^p 范数的特点。

3.2 L^p范数和超椭圆的联系

给定 2 维向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2]^{\mathrm{T}}$，它的 L^p 范数为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_p = \left(|x_1|^p + |x_2|^p\right)^{1/p} \tag{11}$$

当 p 一定时，将 (11) 写成二元函数 $f(x_1, x_2)$：

$$f(x_1, x_2) = \left(|x_1|^p + |x_2|^p\right)^{1/p} \tag{12}$$

观察 L^p 范数的定义，大家可能早已发现 L^p 范数和《数学要素》一册讲过的超椭圆有着千丝万缕的联系。图 3 所示为 p 取不同值时，$f(x_1, x_2)$ 函数对应曲面等高线变化，也就是 L^p 范数取值变化规律。

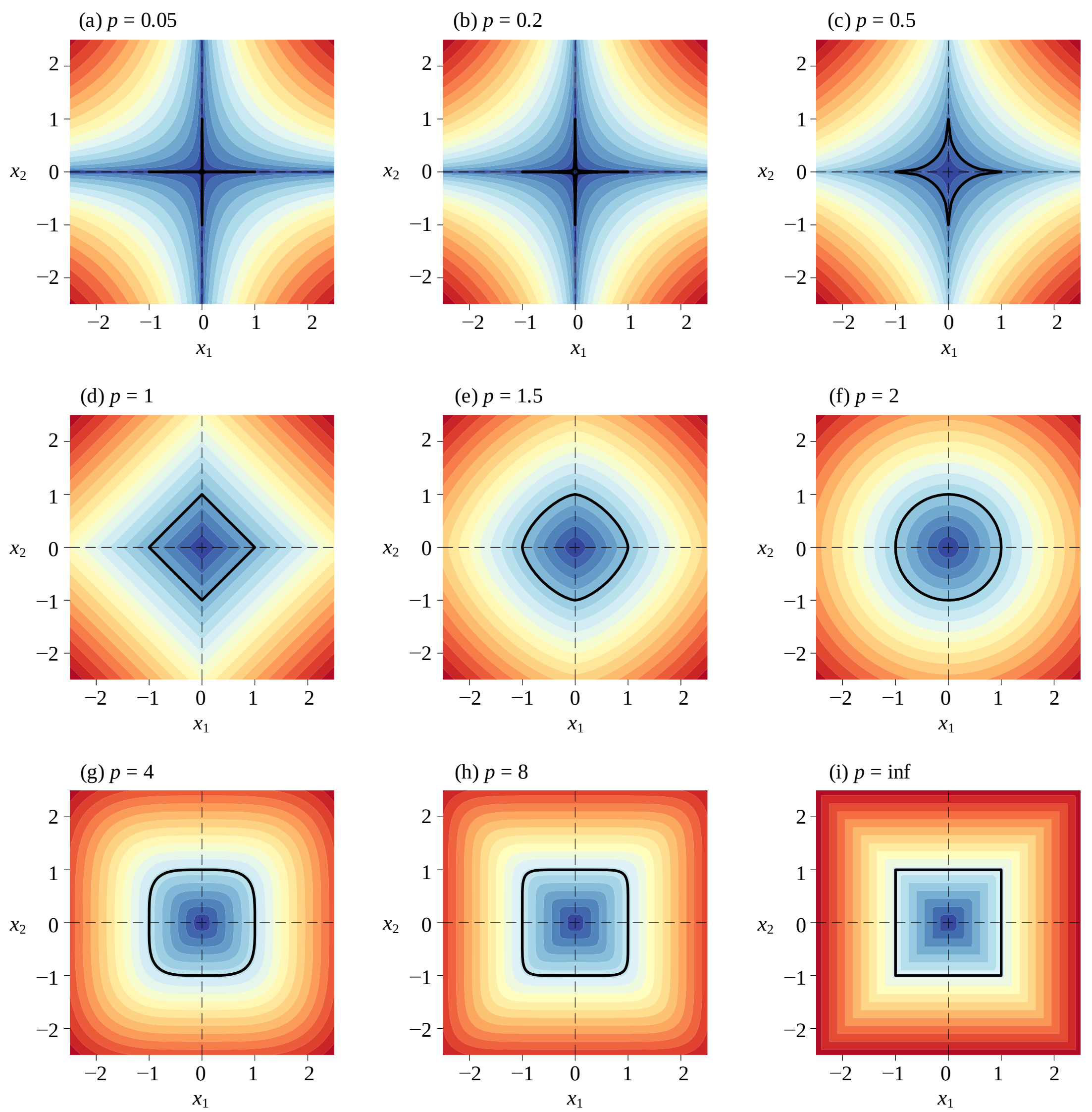


图 3. p 取不同正数时，L^p 范数等高线形状变化

$p = 1$ 时，$f(x_1, x_2)$ 函数的等高线为旋转正方形：

$$f\left(x_1, x_2\right) = \left|x_1\right| + \left|x_2\right| \tag{13}$$

$p = 2$ 时，$f(x_1, x_2)$ 函数等高线为正圆：

$$f\left(x_1, x_2\right) = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \tag{14}$$

$p = +\infty$时，$f(x_1, x_2)$ 函数等高线为正方形：

$$f\left(x_1, x_2\right) = \max\left(\left|x_1\right|, \left|x_2\right|\right) \tag{15}$$

如图 4 所示，L^p 范数取定值 c 时，即 $L^p = c$，随着 p 增大，等高线一层层包裹。

从相反角度，对于同一向量，p 增大，L^p 范数减小。请大家注意如下不等式关系：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty \le \|\boldsymbol{x}\|_2 \le \|\boldsymbol{x}\|_1 \tag{16}$$

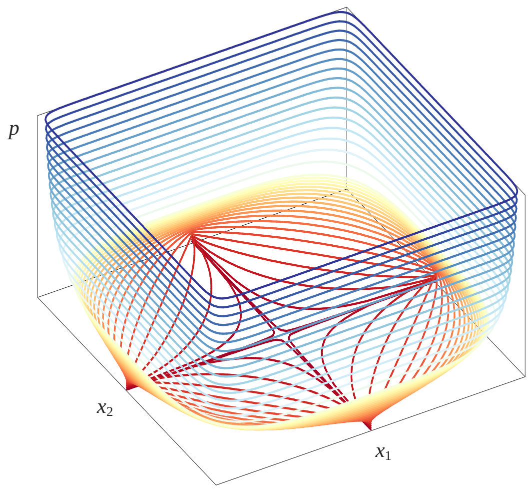


图 4. L^p 范数，随着 p 增大，等高线一层层包裹

凸凹性

$p > 1$ 时，L^p 范数等高线形状为凸，比如图 5 和图 6 两个例子；$0 < p < 1$ 时，L^p 范数等高线形状为凹，比如图 7 和图 8 两个例子。

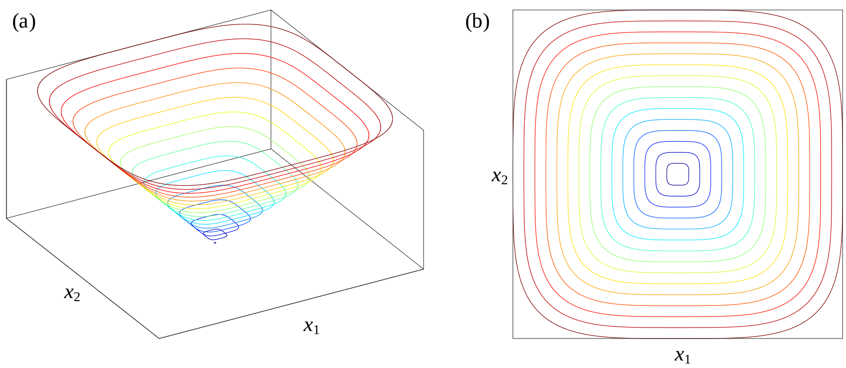


图 5. $p = 4$，L^p 范数等高线图像

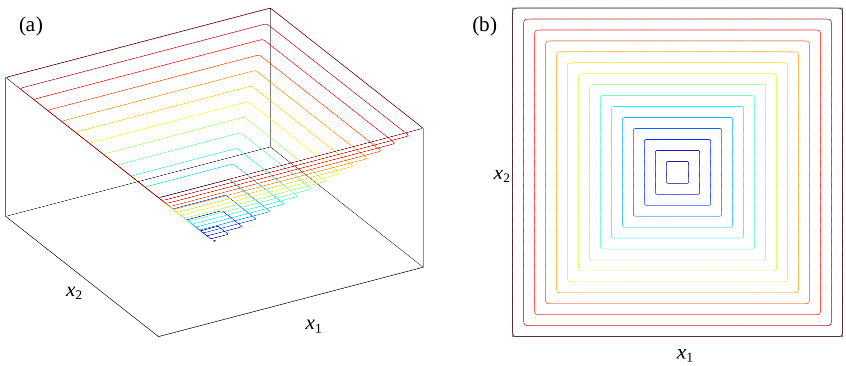


图 6. $p = 100$，L^p 范数等高线图像

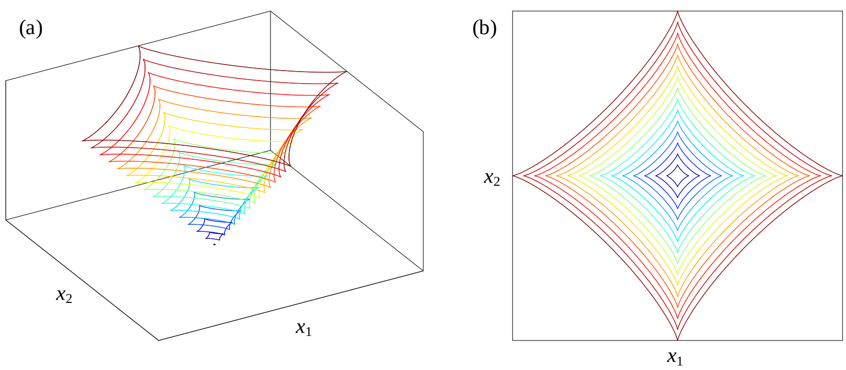


图 7. $p = 0.8$，L^p 范数等高线图像

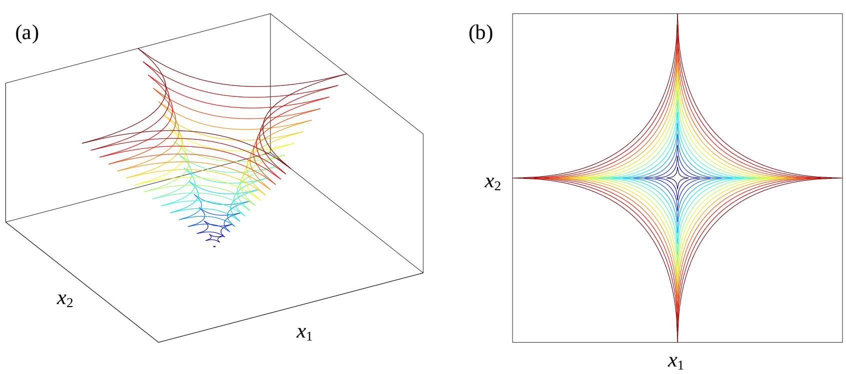


图 8. $p = 0.5$，L^p 范数等高线图像

p 为负数

请读者注意，虽然 L^p 范数 p 的取值一般为正数。有一些情况，p 可以取负数，图 9 所示为 p 取不同负数时，L^p 范数等高线形状变化。

图 10 所示为 $p = -2$，L^p 范数曲面空间和平面等高线。图 11 为 $p = -100$，L^p 范数曲面空间和平面等高线。

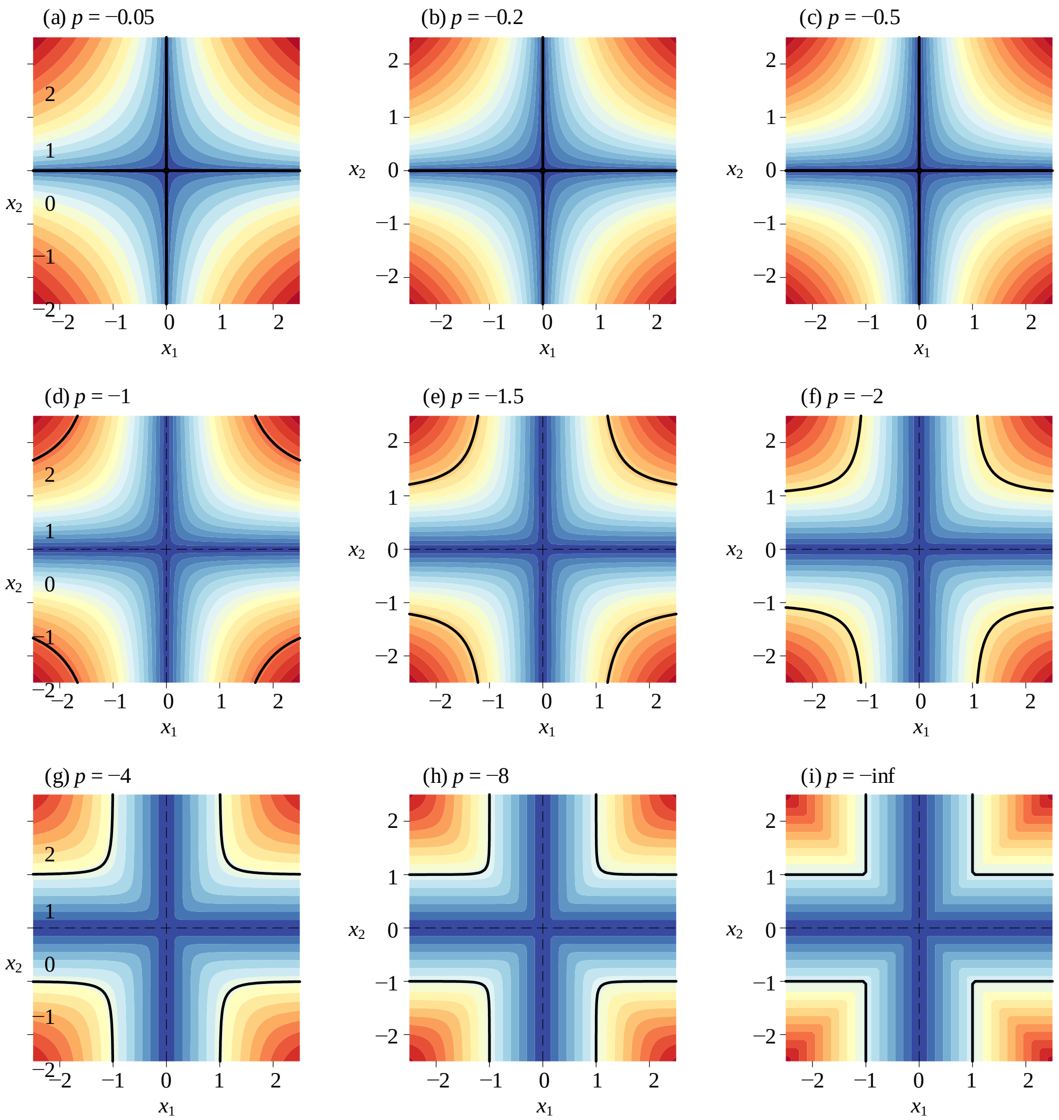


图 9. p 取不同负数时，L^p 范数等高线形状变化

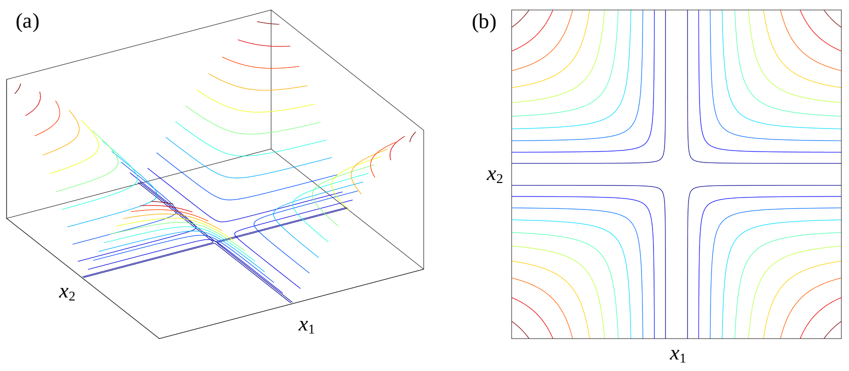


图 10. $p = -2$，L^p 范数等高线图像

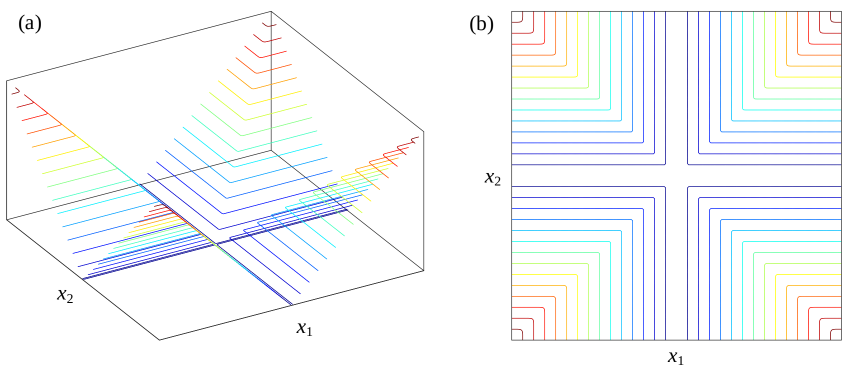


图 11. $p = -100$，L^p 范数等高线图像

Bk4_Ch3_01.py 绘制图 3 所示等高线。

```
# Bk4_Ch3_01.py

import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

p_values = [0.05, 0.2, 0.5, 1, 1.5, 2, 4, 8, np.inf]

x1 = np.linspace(-2.5, 2.5, num=101);
x2 = x1;

xx1, xx2 = np.meshgrid(x1,x2)

fig, axes = plt.subplots(ncols=3,nrows=3,
                         figsize=(12, 12))

for p, ax in zip(p_values, axes.flat):

    if np.isinf(p):
        zz = np.maximum(np.abs(xx1),np.abs(xx2))
    else:
        zz = ((np.abs((xx1))**p) + (np.abs((xx2))**p))**(1./p)
```

```
    # plot contour of Lp
    ax.contourf(xx1, xx2, zz, 20, cmap='RdYlBu_r')

    # plot contour of Lp = 1
    ax.contour (xx1, xx2, zz, [1], colors='k', linewidths = 2)

    # decorations

    ax.axhline(y=0, color='k', linewidth = 0.25)
    ax.axvline(x=0, color='k', linewidth = 0.25)
    ax.set_xlim(-2.5, 2.5)
    ax.set_ylim(-2.5, 2.5)
    ax.spines['top'].set_visible(False)
    ax.spines['right'].set_visible(False)
    ax.spines['bottom'].set_visible(False)
    ax.spines['left'].set_visible(False)
    ax.set_xlabel('$x_1$')
    ax.set_ylabel('$x_2$')
    ax.set_title('p = ' + str(p))
    ax.set_aspect('equal', adjustable='box')

plt.show()
```

3.3 L^1范数：旋转正方形

本节探讨 L^1 范数几何特征。向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^1 范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_D| = \sum_{i=1}^{D} |x_i| \tag{17}$$

当 $D = 2$ 时，L^1 范数为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| \tag{18}$$

(18) 中 L^1 范数等于 1 时，得到解析式：

$$|x_1| + |x_2| = 1 \tag{19}$$

下面，我分成几种情况展开 (19)，并绘制图像。

几何图形

观察 (19) 可以发现，x_1 和 x_2 的取值范围均为 [−1, 1]，x_1 和 x_2 符号可正可负。为了去掉绝对值符号，我们分四种情况考虑，得到如下展开式：

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 & 0 < x_1 < 1,\ \ 0 < x_2 < 1 \\ -x_1 + x_2 = 1 & -1 < x_1 < 0,\ \ 0 < x_2 < 1 \\ x_1 - x_2 = 1 & 0 < x_1 < 1,\ \ -1 < x_2 < 0 \\ -x_1 - x_2 = 1 & -1 < x_1 < 0,\ \ -1 < x_2 < 0 \end{cases} \tag{20}$$

根据 (20) 定义的四个一次函数解析式，可以得到图 12 所示图形。

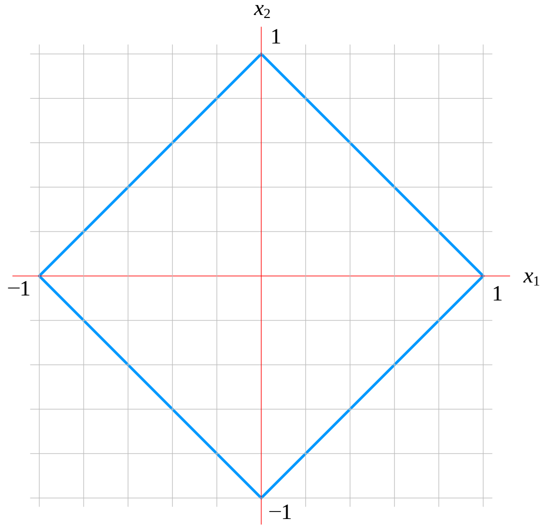


图 12. $|x_1|+|x_2|=1$ 解析式图像

图 13 所示为如下函数的等高线图像：

$$f(x_1, x_2) = |x_1| + |x_2| \tag{21}$$

图 13 中每一条等高线上的点距离原点有相同的 L^1 范数。

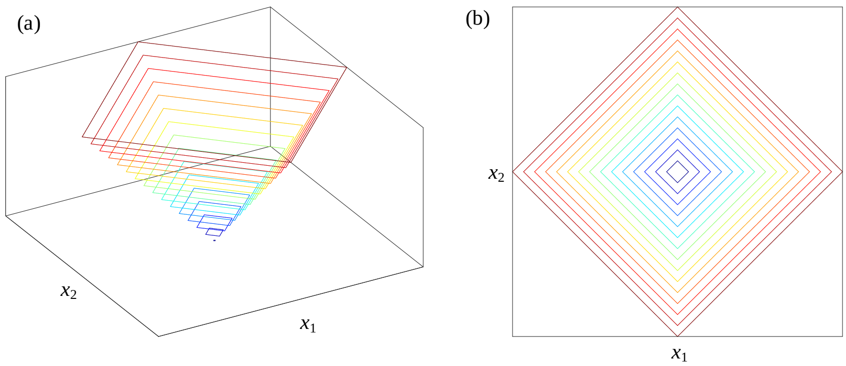


图 13. $p = 1$ 时，L^p 范数等高线图像

L^1 范数是我们将在本系列丛书《机器学习》一册中专门介绍的**城市街区距离** (city block distance)，也称**曼哈顿距离** (Manhattan distance)。

如图 14 所示，一个街区布局方正的城市，从 A 点到 B 点的行走距离不可能是两点的直线距离，即欧氏距离。图中给出的行走路径就是 L^1 范数。

此外，L^1 范数等高线存在“尖点”，这个尖点将会在**套索回归** (LASSO regression) 的 L1 正则项中起到重要作用。

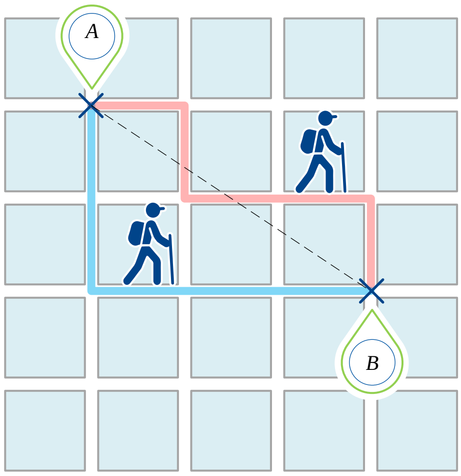


图 14. 城市街区距离

3.4 L^2 范数：正圆形

本节探讨 L^2 范数形状。D 维向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^2 范数定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \left(x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_D^2\right)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{D} |x_i|^2\right)^{1/2} \tag{22}$$

特别地，当特征数 $D = 2$ 时，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^2 范数为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2} \tag{23}$$

从距离度量角度，L^2 范数为欧几里得距离。

再次强调，范数、向量内积、矩阵乘法关系：

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \|\boldsymbol{x}\|^2 = |\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle|^2 = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} \tag{24}$$

(23) 中 L^2 范数等于 1 时，对应如下平面图形解析式：

$$x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{25}$$

图 15 所示为 (25) 图像。图 16 所示为 L^2 三维和二维等高线图像。

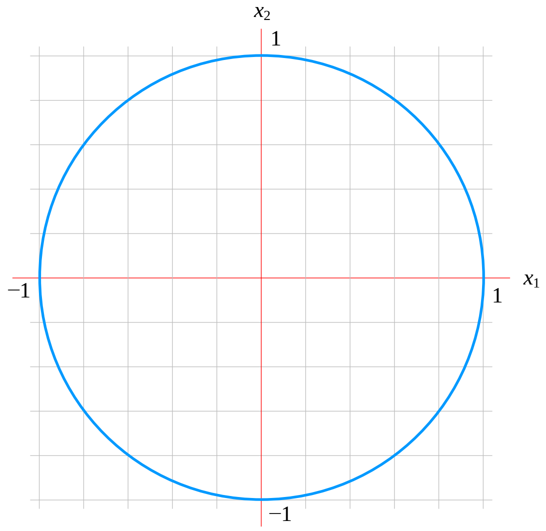


图 15. $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 解析式图像

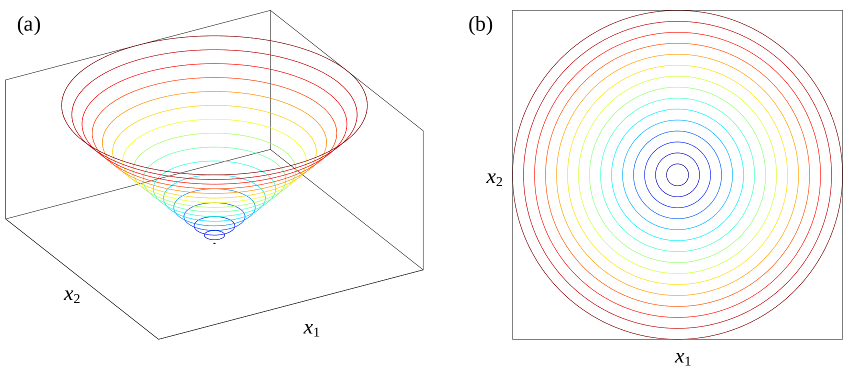


图 16. $p = 2$，L^p 范数等高线图像

另外，实践中也经常使用 L^2 范数的平方，即，

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = x_1^2 + x_2^2 \tag{26}$$

图 17 所示为 L^2 范数平方的平面和三维等高线图像。

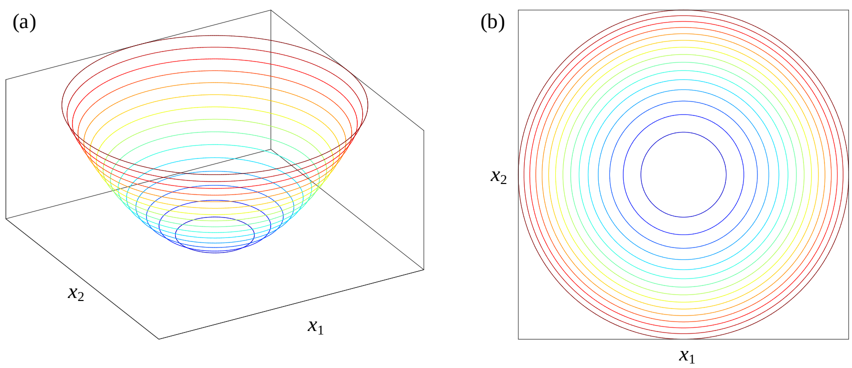


图 17. $p = 2$，L^p 范数平方等高线图

图 18 所示为当 $D = 3$ 时，p 分别取 1 和 2 时，L^p 范数对应的几何体。

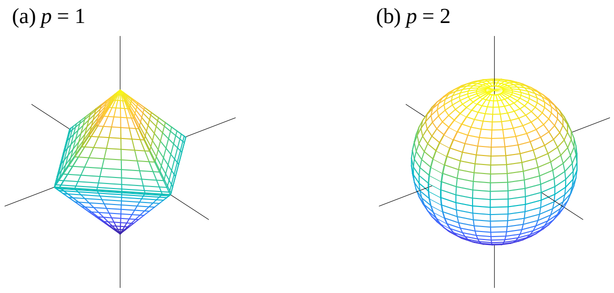


图 18. $p = 1$、2，$D = 3$ 时，L^p 范数对应的几何体

本系列丛书《数学要素》中简单讨论过向量范数在岭回归和套索回归的应用。岭回归引入的是 L^2 正则项，套索回归引入 L^1 正则项。

我们这里在介绍一种正则化回归——弹性网络回归 (elastic net regression)。弹性网络回归以不同比例同时引入 L^1 和 L^2 正则项。图 19 所示，正则化曲面是 L^1 和 L^2 曲面按不同比例叠加。注意，比例可以根据不同应用场景调整。图 19 中正则化曲面既有 L^1 的“尖点”，也有 L^2 的凸曲面。

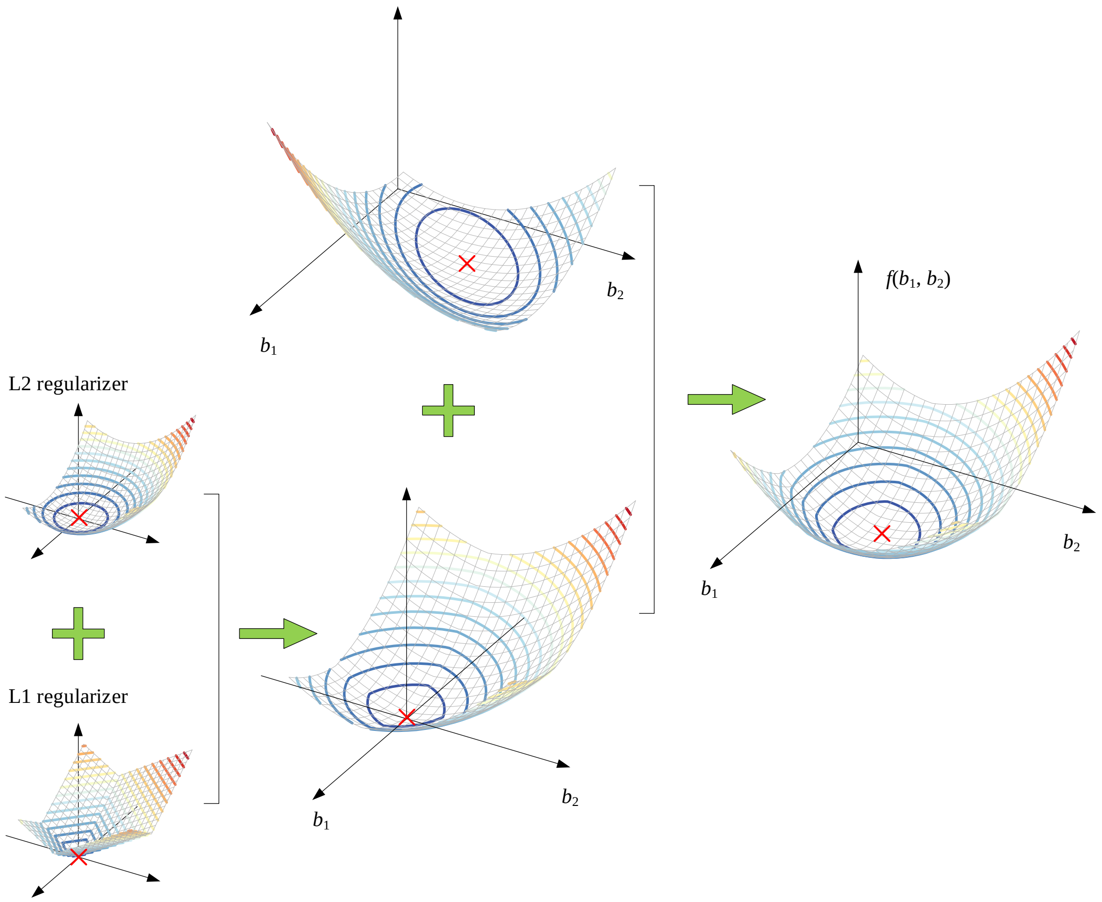


图 19. 弹性网络回归参数曲面

高斯函数、高斯核函数

本系列丛书《数学要素》一册介绍过高斯函数。一元高斯函数的基本形式为:

$$f(x) = \exp\left(-x^2\right) \tag{27}$$

二元高斯函数的基本形式为:

$$f(x_1, x_2) = \exp\left(-\left(x_1^2 + x_2^2\right)\right) \tag{28}$$

有了 L^2 范数，我们就可以定义一个重要的函数——高斯核函数:

$$\kappa_{\text{RBF}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q}) = \exp\left(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_2^2\right) = \exp\left(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|^2\right) \tag{29}$$

其中，$\gamma > 0$。高斯核函数也叫径向基核函数 (radial basis function kernel 或 RBF kernel)。

图 20 所示 γ 对二元高斯核函数形状影响。γ 越大坡面越陡峭。

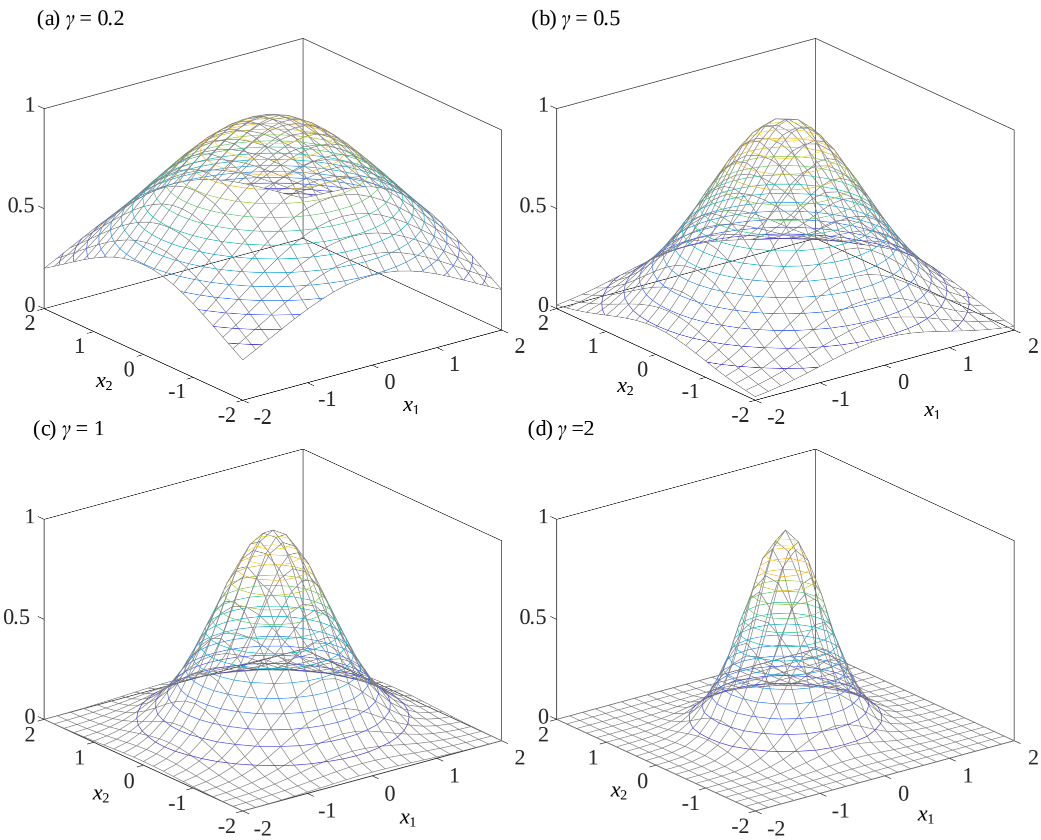


图 20. 高斯核曲面随 γ 变化

(29) 中 $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\|_2^2$ 是 L^2 范数平方，即 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{q}$ 两点欧几里得距离平方。

(29) 也可以写成：

$$\kappa_{\text{RBF}}\left(\boldsymbol{x},\boldsymbol{q}\right)=\exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\|^2}{2\sigma^2}\right) \tag{30}$$

不等式

相信读者朋友都知道，三角形两边之和大于第三边；应用到向量 L^2 范数，对应如下不等式：

$$\|\boldsymbol{u}\|_2+\|\boldsymbol{v}\|_2\geq\|\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}\|_2 \tag{31}$$

比如下例：

$$\boldsymbol{u}=\begin{bmatrix}4 & 3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{v}=\begin{bmatrix}-2 & 4\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{32}$$

向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 两者之和为：

$$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}=\begin{bmatrix}4 & 3\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}+\begin{bmatrix}-2 & 4\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}2 & 7\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{33}$$

图 21 所示为向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 以及 $\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$ 在平面上的关系。

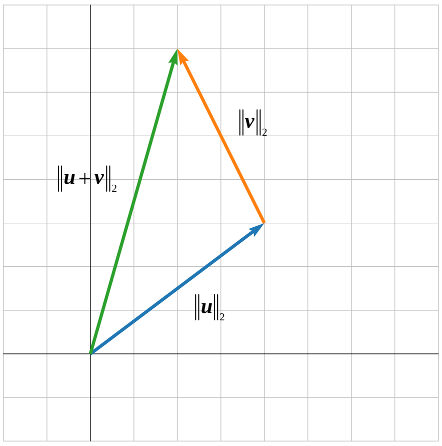


图 21. 向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 以及两者之和

$\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的 L^2 范数分别为：

$$\|\boldsymbol{u}\|_2=\sqrt{4^2+3^2}=5,\quad \|\boldsymbol{v}\|_2=\sqrt{\left(-2\right)^2+4^2}=\sqrt{20}\approx 4.4721 \tag{34}$$

$\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的 L^2 范数和为：

$$\|\boldsymbol{u}\|_2 + \|\boldsymbol{v}\|_2 \approx 9.4721 \tag{35}$$

$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$ 的 L^2 范数为：

$$\|\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}\|_2 = \sqrt{2^2+7^2} = \sqrt{54} \approx 7.2801 \tag{36}$$

显然，(31) 成立。

Bk4_Ch3_02.py 绘制图 21 图 18。

```python
# Bk4_Ch3_02.py

import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
import seaborn as sns

u = [0,0,4, 3]
v = [0,0,-2,4]
u_bis = [4,3,v[2],v[3]]
w = [0,0,2,7]

fig, ax = plt.subplots()

plt.quiver([u[0], u_bis[0], w[0]],
           [u[1], u_bis[1], w[1]],
           [u[2], u_bis[2], w[2]],
           [u[3], u_bis[3], w[3]],
           angles='xy', scale_units='xy',
           scale=1, color=sns.color_palette())

plt.axvline(x=0, color='grey')
plt.axhline(y=0, color='grey')

plt.text(3, 1, r'$||\vec{u}||_2$',
         color=sns.color_palette()[0], size=12,
         ha='center',va='center')

plt.text(3, 6, r'$||\vec{v}||_2$',
         color=sns.color_palette()[1], size=12,
         ha='center',va='center')

plt.text(0, 4, r'$||\vec{u}+\vec{v}||_2$',
         color=sns.color_palette()[2], size=12,
         ha='center',va='center')

plt.ylabel('$x_2$')
plt.xlabel('$x_1$')
plt.axis('scaled')
ax.set_xticks(np.arange(-2,8 + 1))
ax.set_yticks(np.arange(-2,8 + 1))
ax.set_xlim(-2, 8)
ax.set_ylim(-2, 8)
ax.grid(linestyle='--', linewidth=0.25, color=[0.5,0.5,0.5])

# reference: Essential Math for Data Science
```

3.5 L^∞范数：正方形

D 维向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^∞范数的定义为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|x_1|,|x_2|,\cdots,|x_D|\right) \tag{37}$$

上式就是我们将在丛书《机器学习》一册讲解的**切比雪夫距离** (Chebyshev distance)。

当特征数 $D = 2$ 时，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 L^∞范数为：

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\left(|x_1|,|x_2|\right) \tag{38}$$

当 L^∞范数为 1 时，可以得到如下平面图形解析式：

$$\max\left\{|x_1|,\quad |x_2|\right\} = 1 \tag{39}$$

借助丛书在数学部分讲解的圆锥曲线内容，我们一起推导 (39) 解析式对应的图像。

几何图形

观察 (39) 可以发现，x_1 和 x_2 的取值范围均为 $[-1, 1]$，x_1 和 x_2 符号可正可负。同样分情况讨论，得到解析式如下展开式：

$$\begin{cases} |x_1| = 1 & |x_1| > |x_2| \\ |x_2| = 1 & |x_2| > |x_1| \end{cases} \tag{40}$$

为了进一步展开 (40)，需要分析 $|x_1|$ 和 $|x_2|$ 大小关系。如果，$|x_1| > |x_2|$成立，不等式两边平方，并整理得到：

$$x_1^2 - x_2^2 > 0 \tag{41}$$

当把大于号 > 换成等号 = 时，得到下式：

$$x_1^2 - x_2^2 = 0 \tag{42}$$

回忆丛书本系列丛书《数学要素》一册讲过的双曲线内容，可以很容发现，(42) 为蜕化双曲线，如图 22 所示蓝色线。(41) 所示的不等式区域对应的是图 22 所示阴影区域。

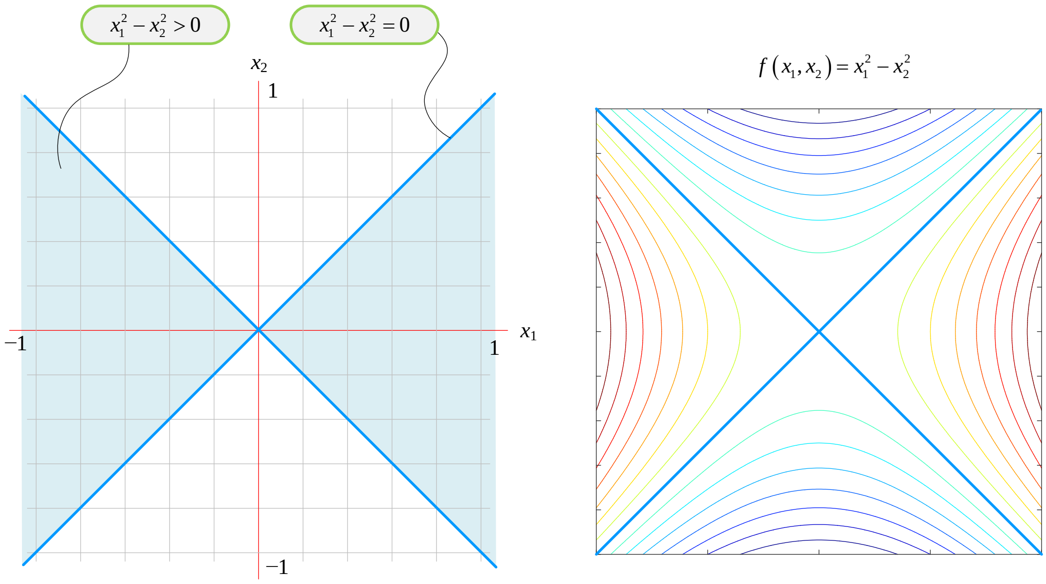


图 22. 蜕化双曲线及不等式区域

根据以上区域划分，改写 (40) 得到：

$$
\begin{cases} x_1 = \pm 1 & x_1^2 - x_2^2 > 0 \\ x_2 = \pm 1 & x_1^2 - x_2^2 < 0 \end{cases} \tag{43}
$$

由于 x_1 和 x_2 的取值范围均为 $[-1, 1]$，所以在图 22 所示阴影区域中，函数图像为两条竖直线段 ($x_1 = \pm 1$)；类似地，在 $x_1^2 - x_2^2 < 0$ 对应区域中，函数对象为两条水平线段 ($x_2 = \pm 1$)。

综合以上分析，可以得到 (39) 对应的函数图像，具体如图 23 所示。

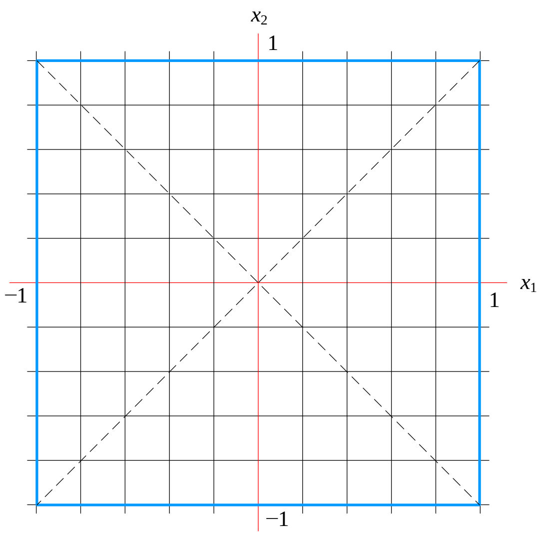


图 23. $\max\{|x_1|, \ |x_2|\} = 1$ 解析式图像

本章从几何视角和大家聊了 L^p 范数。L^p 范数在本系列丛书的应用主要有两大方面：1) 距离度量；2) 正则化。以下这四副图像总结本章的主要内容。

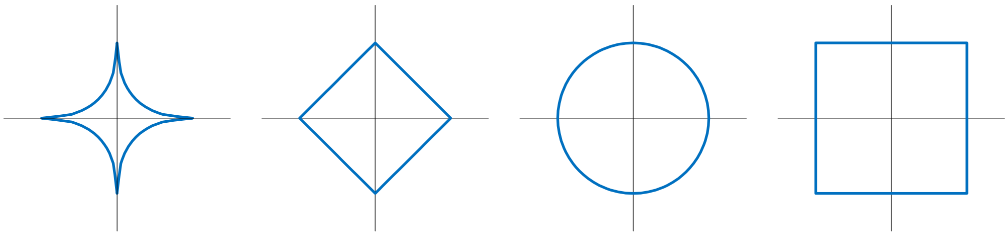


图 24. 总结本章重要内容的四副图

请大家注意本章内容和本系列丛书《数学要素》中介绍的"等距线"和"超椭圆"这两个数学概念的联系。