7 Vector Space 向量空间

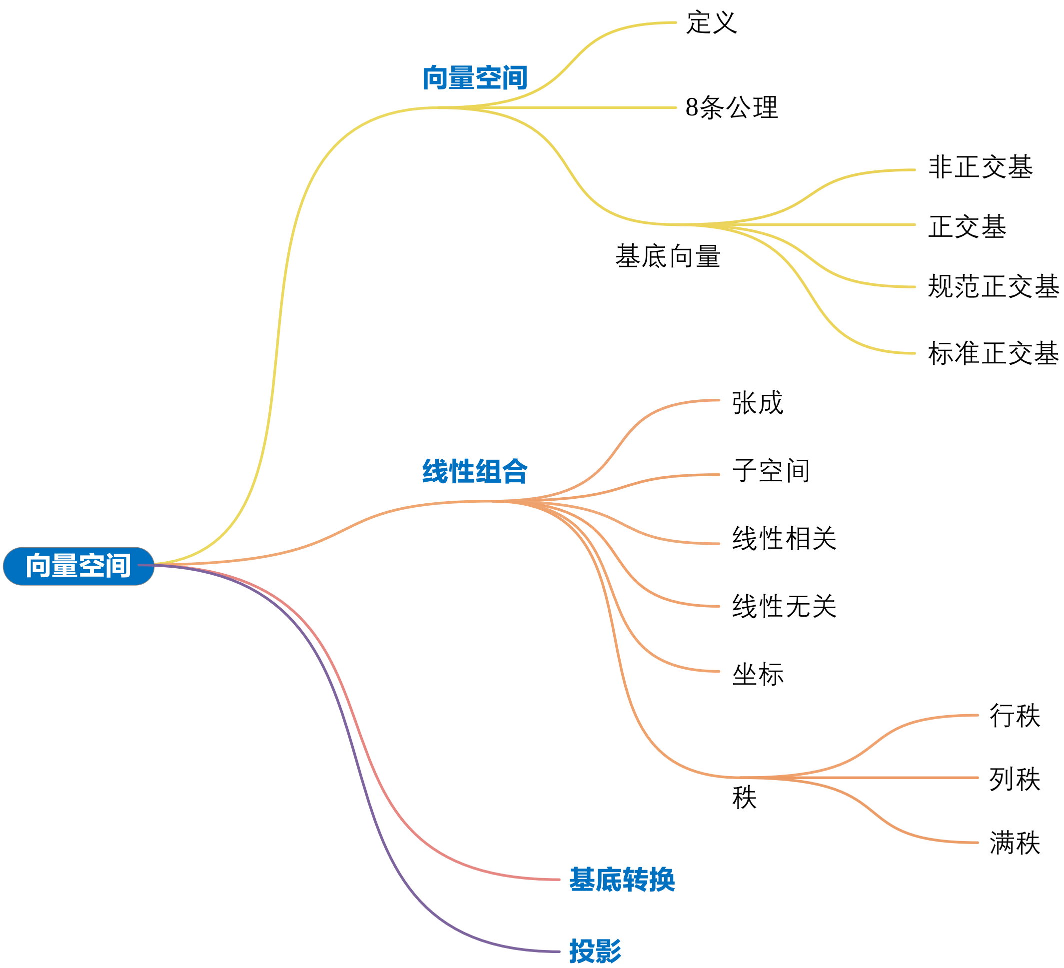
用三原色给向量空间涂颜色

数学，是神灵创造宇宙的语言。

Mathematics is the language in which God has written the universe.

—— 伽利略·伽利莱 (Galilei Galileo) | 意大利物理学家、数学家及哲学家 | 1564 ~ 1642

◄ `numpy.linalg.matrix_rank()` 计算矩阵的秩


向量空间
向量空间
定义
8条公理
基底向量
非正交基
正交基
规范正交基
标准正交基
线性组合
张成
子空间
线性相关
线性无关
坐标
秩
行秩
列秩
满秩
基底转换
投影

6.1 向量空间：从直角坐标系说起

注意，本节很长，可能有点枯燥！

但是，请坚持看完这一节，色彩斑斓的内容在本节之后。

笛卡尔坐标系

向量空间 (vector space) 是笛卡尔坐标系的自然延伸。图 1 给出二维和三维直角坐标系，在向量空间中，它俩就是最基本的欧几里得向量空间 $\mathbb{R}^n$ $(n = 2, 3)$。

在这两个向量空间中，我们可以完成向量的加减、标量乘法等一系列运算。

在平面 $\mathbb{R}^2$ 上，坐标点 (x_1, x_2) 无死角全面覆盖平面上所有点。这就是说，从向量角度，$x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2$ 代表平面上所有的向量。

类似地，在三维空间 $\mathbb{R}^3$ 中，$x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2 + x_3\boldsymbol{e}_3$ 代表三维空间中所有的向量。

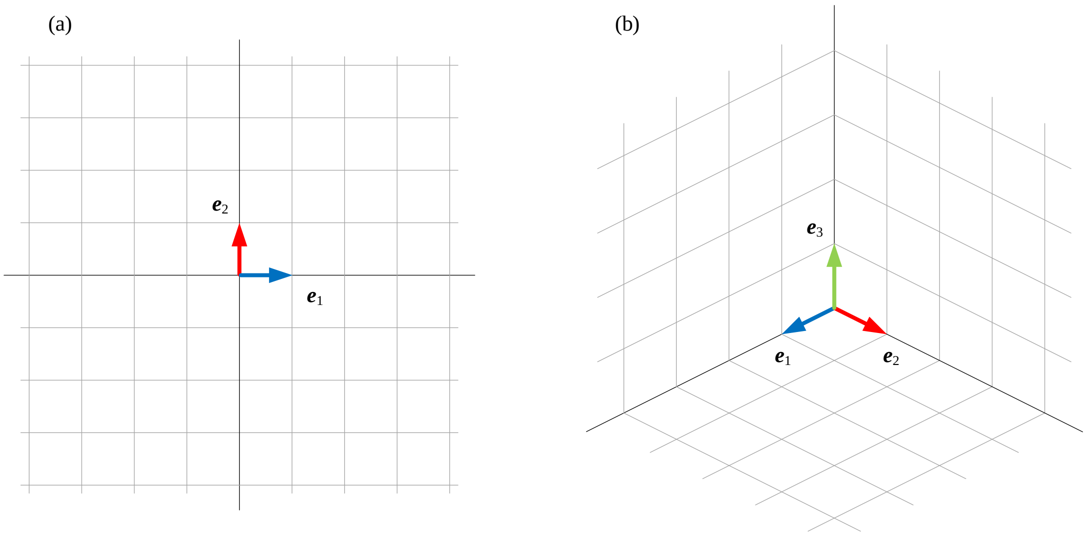


图 1. 二维和三维直角坐标系

向量空间

我们下面看一下向量空间的定义，不需要大家格外记忆！

给定域 F，F 上的向量空间 V 是一个集合。集合 V 非空，且对于加法和标量乘法运算封闭。这意味着，对于 V 中的每一对元素 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$，可以唯一对应 V 中的一个元素 $\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}$；而且，对于 V 中的每一个元素 $\boldsymbol{v}$ 和任意一个标量 k，可以唯一对应 V 中元素 $k\boldsymbol{v}$。

如果 V 连同上述加法运算和标量乘法运算满足如下公理，则称 V 为向量空间。

公理 1：**向量加法交换律** (commutativity of vector addition)；对于 V 中任何 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{u} \tag{1}$$

公理 2：**向量加法结合律** (associativity of vector addition)；对于 V 中任何 $\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{w}$，满足：

$$(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})+\boldsymbol{w}=\boldsymbol{u}+(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}) \tag{2}$$

公理 3：**向量加法恒等元** (addictive identity)；V 中存在零向量的元素 $\boldsymbol{0}$，使得对于任意 V 中元素 $\boldsymbol{v}$，下式成立：

$$\boldsymbol{v}+\boldsymbol{0}=\boldsymbol{v} \tag{3}$$

公理 4：**存在向量加法逆元素** (existence of additive inverse)；对于每一个 V 中元素 $\boldsymbol{v}$，选在 V 中的另外一个元素 $-\boldsymbol{v}$，满足：

$$\boldsymbol{v}+(-\boldsymbol{v})=\boldsymbol{0} \tag{4}$$

公理 5：**标量乘法对向量加法的分配率** (distributivity of vector sums)；对于任意标量 k，V 中元素 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 满足：

$$k(\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v})=k\boldsymbol{u}+k\boldsymbol{v} \tag{5}$$

公理 6：**标量乘法对域加法的分配率** (distributivity of scalar sum)；对于任意标量 k 和 t，以及 V 中任意元素 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$(k+t)\boldsymbol{v}=k\boldsymbol{v}+t\boldsymbol{v} \tag{6}$$

公理 7：**标量乘法与标量的域乘法相容** (associativity of scalar multiplication)；对于任意标量 k 和 t，以及 V 中任意元素 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$(kt)\boldsymbol{v}=k(t\boldsymbol{v}) \tag{7}$$

公理 8：**标量乘法的单位元** (scalar multiplication identity)；V 中任意元素 $\boldsymbol{v}$，满足：

$$1\cdot\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v} \tag{8}$$

线性组合

令 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ … $\boldsymbol{v}_D$ 为向量空间 V 中的向量。下式被称作向量 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ … $\boldsymbol{v}_D$ 的**线性组合** (linear combination)。

$$\alpha_1\boldsymbol{v}_1+\alpha_2\boldsymbol{v}_2+\cdots+\alpha_D\boldsymbol{v}_D \tag{9}$$

其中，α_1、α_2 … α_D 均为实数。

张成

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ … $\boldsymbol{v}_D$所有线性组合的集合称作 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ … $\boldsymbol{v}_D$ 的张成，记做 span($\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2$ … $\boldsymbol{v}_D$)。

线性相关和线性无关

给定向量组 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_D]$，如果存在不全为零 α_1、α_2、…、α_D 使得下式成立。

$$\alpha_1\boldsymbol{v}_1 + \alpha_2\boldsymbol{v}_2 + \alpha_3\boldsymbol{v}_3 + \dots + \alpha_D\boldsymbol{v}_D = \boldsymbol{0} \tag{10}$$

则称向量组 $\boldsymbol{V}$ **线性相关** (linear dependence，形容词为 linearly dependent)；否则，$\boldsymbol{V}$ **线性无关** (linear independence，形容词为 linearly independent)。

图 2 在平面上解释了线性相关和线性无关。

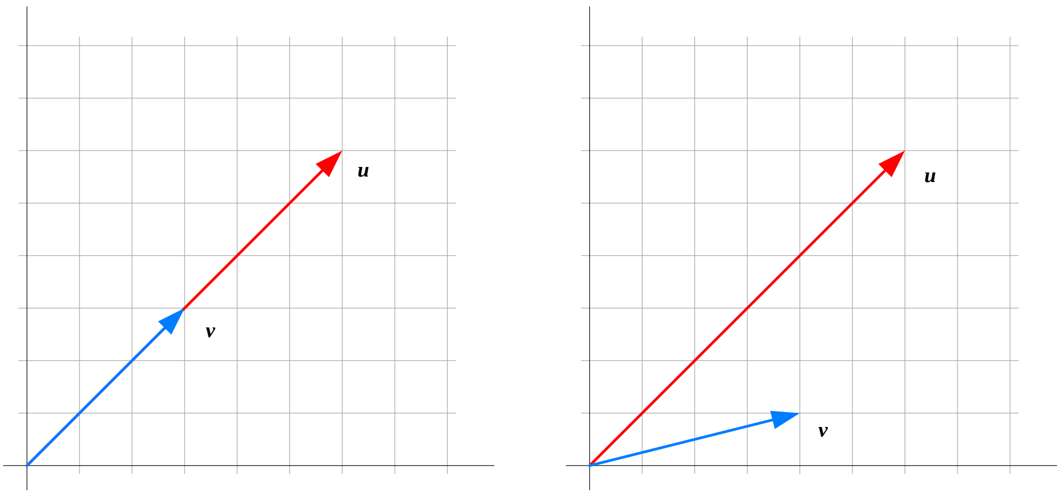


图 2. 平面上解释线性相关与线性无关

极大无关组、秩

一个矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的**列秩** (column rank) 是 $\boldsymbol{X}$ 的线性无关的纵列最大值。类似地，**行秩** (row rank) 是 $\boldsymbol{X}$ 的线性无关的横行最大值。

以列秩为例，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以写成一系列列向量：

$$\boldsymbol{X}_{n\times D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 & \boldsymbol{x}_2 & \cdots & \boldsymbol{x}_D \end{bmatrix} \tag{11}$$

对于 $F = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_D\}$，如果它们线性相关，就总可以找出一个冗余向量，把它剔除。

如此往复，不断剔除冗余向量，直到不再有冗余向量为止，得到 $S = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_r\}$ 线性无关。则称 $S = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_r\}$ 为 $F = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_D\}$ 的极大线性无关组 (maximal linearly independent subset)。注意，极大线性无关组不唯一。

极大线性无关组的元素数量 r 为 $F = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_D\}$ 的秩，也称为 F 的维数或维度。

矩阵的列秩和行秩总是相等的，因此它们可以简单地称作矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的秩 (rank)，记做 $\text{rank}(\boldsymbol{X})$。

请读者注意，如果方阵 $\boldsymbol{A}_{D\times D}$ 可逆，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 为满秩，即 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = D$。

如果乘积 $\boldsymbol{AB}$ 存在，$\boldsymbol{AB}$ 的秩满足：

$$\text{rank}\left(\boldsymbol{AB}\right) \leq \min\left(\text{rank}\left(\boldsymbol{A}\right), \text{rank}\left(\boldsymbol{B}\right)\right) \tag{12}$$

对于实数矩阵 $\boldsymbol{X}$，以下几个矩阵的秩相等：

$$\text{rank}\left(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\right) = \text{rank}\left(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T\right) = \text{rank}\left(\boldsymbol{X}\right) = \text{rank}\left(\boldsymbol{X}^T\right) \tag{13}$$

`numpy.linalg.matrix_rank()` 计算矩阵的秩。

基底向量

一个向量空间 V 的**基底向量** (vector basis 或 basis) 指 V 中的子集 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2 \ldots \boldsymbol{v}_n$，它们**线性无关** (linearly independent)，**张成** (span) 向量空间 V。向量空间中的每一个向量都可以唯一地表示成基底向量的线性组合。

白话说，基底向量就像是地图上的经度和纬度，起到的是定位作用。有了经纬度之后，地面上的任意一点都有其特定的经纬度坐标。

这就是本节最开始说的，$\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\}$ 就是平面 $\mathbb{R}^2$ 一组基底，平面 $\mathbb{R}^2$ 上每一个向量都可以唯一地表达成 $x_1\boldsymbol{e}_1 + x_2\boldsymbol{e}_2$。而 (x_1, x_2) 就是在基底 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 下的坐标。

注意区别$\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\}$ 和 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$。本书会用 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 表达有序基，也就是向量基底元素按“先 $\boldsymbol{e}_1$ 后 $\boldsymbol{e}_2$”顺序排列。而 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2\}$ 一般不强调基底向量顺序。

此外，有序基 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 相当于由向量构造得到一个矩阵。不做特殊说明，本书中的向量基底都默认为有序基。

维数

向量空间的维数 (dimension) 是基底中基底向量的个数，本书采用的维数记号为 dim()。

图 1 (a) 中 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2)$，即 $\mathbb{R}^2$ 维数 $\dim(\mathbb{R}^2) = 2$，而 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 的秩也是 2。图 1 (b) $\mathbb{R}^3 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3)$，即 $\mathbb{R}^3$ 维数 $\dim(\mathbb{R}^3) = 3$，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 的秩为 3。

下面，为了理解维数这个概念，我们多看几组例子。

图 3 所示为 6 个维度为 1 的向量空间。

图 4 所示为线性无关的向量张起的维数为 2 的空间。也就是说，图 4 每幅子图中的两个向量分别是该空间的基底向量。

图 5 所示为线性相关的向量张起的维数为 2 的空间。举个例子，$\mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2)$ 张起的空间维度为 2，显然 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2]$ 线性相关。进一步分析可以知道 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2]$ 的秩为 2。

强调一点，基底中的向量之间必须线性无关，而用 span() 张成空间的向量可以线性相关。比如，$\mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2) = \mathrm{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2) = \mathrm{span}\ (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + 2\boldsymbol{e}_2) = \mathrm{span}\ (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, 2\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2)$。

由于基底向量则必须线性无关，以 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2]$ 为例，剔除掉其中冗余向量，比如 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 是基底，$[\boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + 2\boldsymbol{e}_2]$ 也可以是基底。不同的是，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 中基底向量正交，但是 $[\boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2]$ 这个基底中的向量并非正交。也就是构成向量空间的基底向量可以正交，也可以非正交，这是下文马上要探讨的内容。

图 6 所示为线性无关的向量张起维数为 3 的空间。注意这些空间都是和 $\mathbb{R}^3$ 等价。

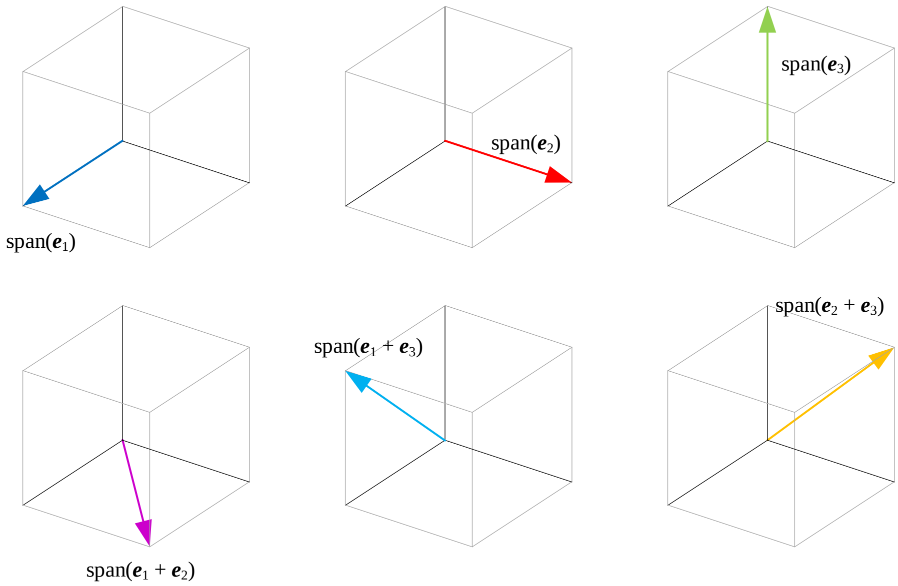


图 3. 维数为 1 的向量空间

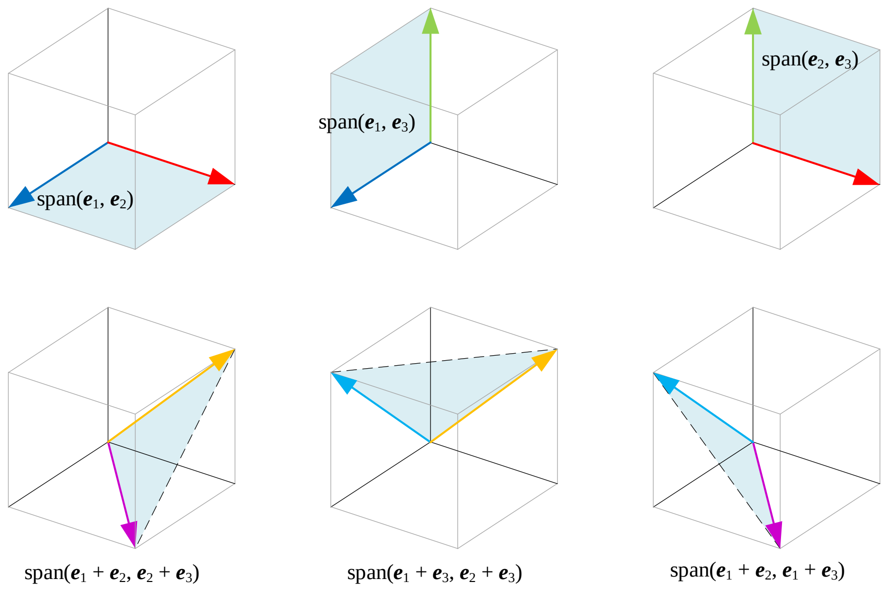


图 4. 维数为 2 的向量空间，线性无关

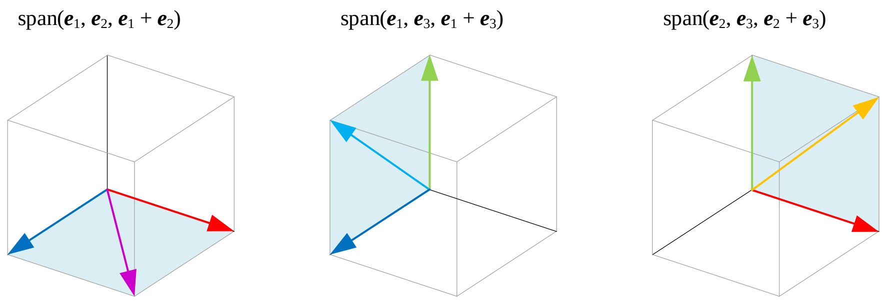


图 5. 维数为 2 的向量空间，线性相关

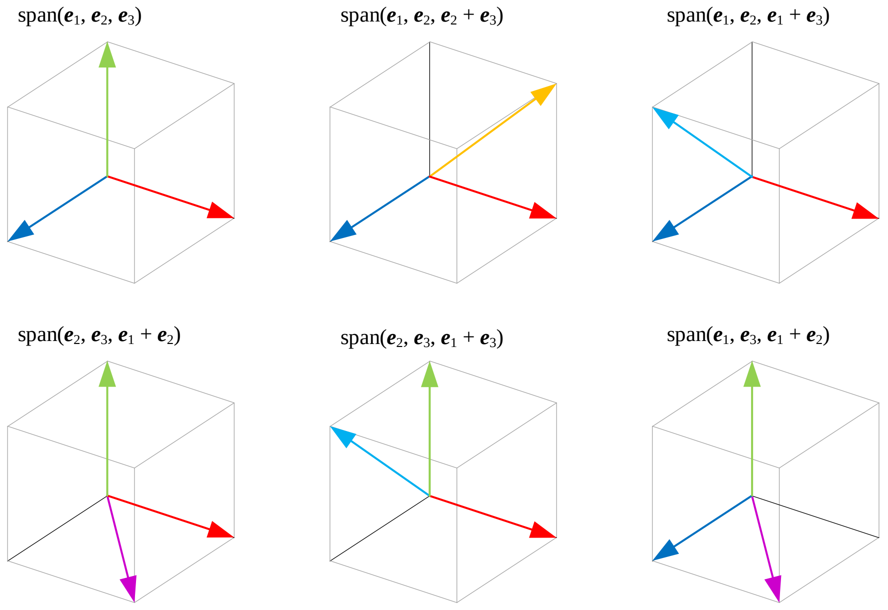


图 6. 维数为 3 的向量空间

基底选择并不唯一

此外，我们之所以强调 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 是平面 $\mathbb{R}^2$ 一组基底向量，这是因为 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 不是平面 $\mathbb{R}^2$ 唯一的一组基底向量。

大家还记得本书前文给出图 7 的这幅图吗？

$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 都是平面 $\mathbb{R}^2$ 基底向量！也就是说 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2) = \text{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2) = \text{span}(\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2)$。

而平面 $\mathbb{R}^2$ 上的向量 $\boldsymbol{x}$ 在 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 这三组基底向量中都有各自的唯一坐标。

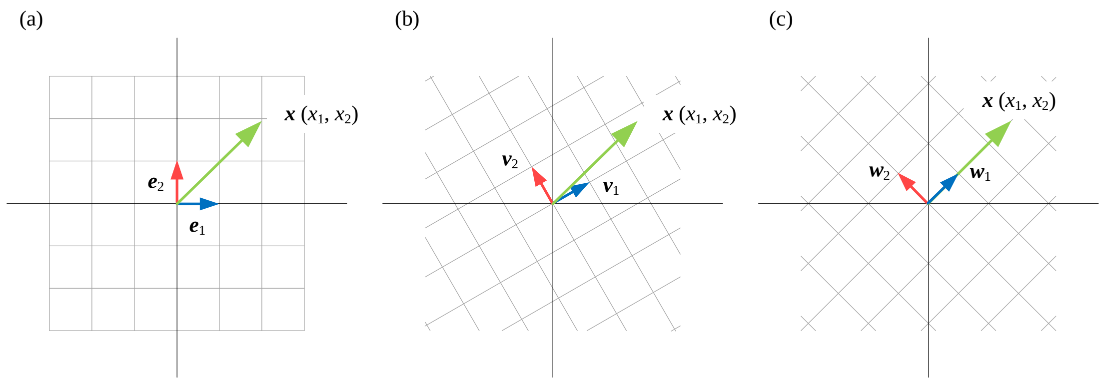


图 7. 向量 $\boldsymbol{x}$ 在三个不同的正交直角坐标系中位置

正交基、规范正交基、标准正交基

大家可能早已注意到图 7 中，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 的每个基底向量都是单位向量，$\|\boldsymbol{e}_1\| = \|\boldsymbol{e}_2\| = \|\boldsymbol{v}_1\| = \|\boldsymbol{v}_2\| = \|\boldsymbol{w}_1\| = \|\boldsymbol{w}_2\| = 1$。

且每组基底向量本身相互正交，即 $\boldsymbol{e}_1$ 垂直 $\boldsymbol{e}_2$，$\boldsymbol{v}_1$ 垂直 $\boldsymbol{v}_2$，$\boldsymbol{w}_1$ 垂直 $\boldsymbol{w}_2$。

注意本书中，满足正交的基底向量，叫做**正交基** (orthogonal basis)。

如果正交基中每一个基底向量的模为 1，则称**规范正交基** (orthonormal basis)。图 7 中$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$、$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$、$[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 三组基底向量都是标准正交基。显然，可以张成平面 $\mathbb{R}^2$ 的标准正交基有无数组。它们之间存在旋转关系，也就是说 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 绕原点旋转一定角度就可以得到 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 或 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$。

更特殊的是，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 叫做平面 $\mathbb{R}^2$ 的**标准正交基** (standard orthonormal basis)，或称**标准基** (standard basis)。"标准"这个字眼给了 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$，是因为用这个基表示平面 $\mathbb{R}^2$ 最为自然。$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 也是平面直角坐标系最普遍的参考系。

显然，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的标准正交基，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{e}_D]$ 是 $\mathbb{R}^D$ 的标准正交基。

非正交基

基底中的向量可以非正交，我们在图 6 中已经看到很多例子。

举个例子，平面 $\mathbb{R}^2$ 上，任何两个不平行的向量都可以构成平面上的一个基底。基底之间两两不都是垂直关系的叫做非正交基 (non-orthogonal basis)。

图 8 所示为两组非正交基底，它们也都张起 $\mathbb{R}^2$ 平面，即 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2) = \text{span}(\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2)$。

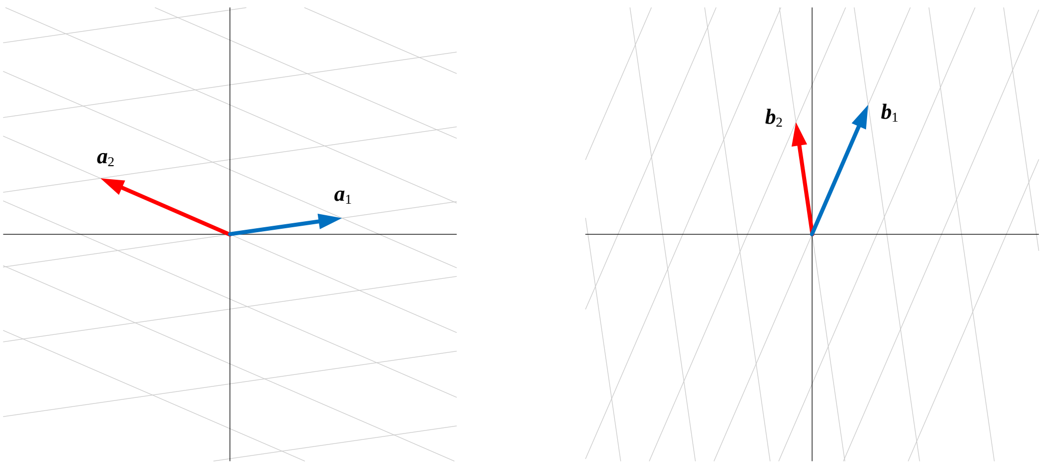


图 8. 二维平面的两个基底，非正交

图 9 总结了几种基底之间的关系。

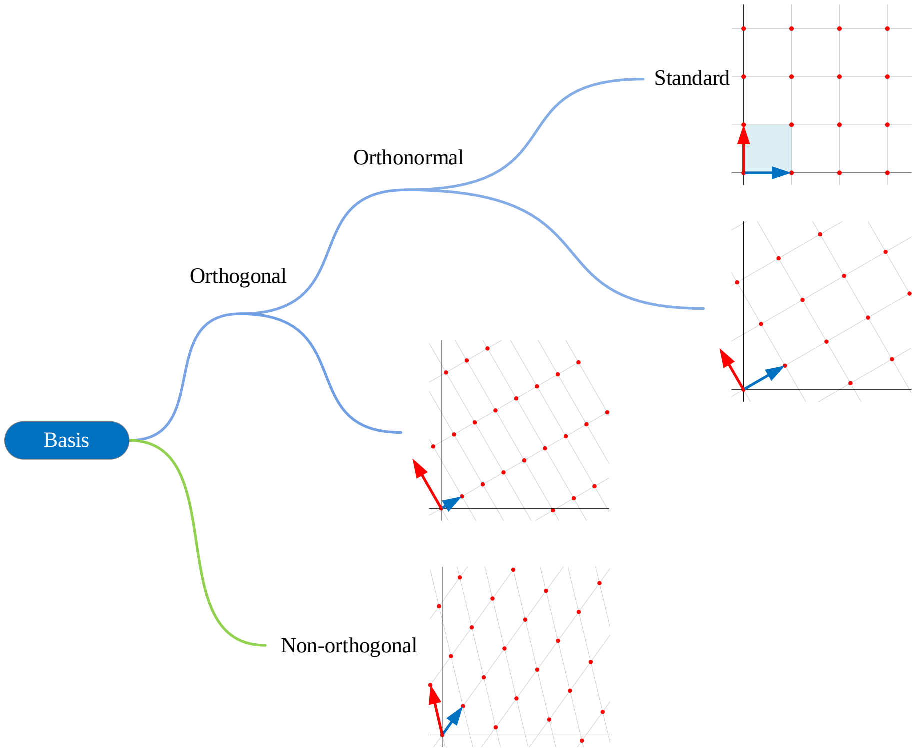


图 9. 几种基底之间的关系

基底转换

本节前文提到了各种基底，**基底转换** (change of basis) 可以完成不同基底之间变换，而标准正交基是常用的桥梁。

给定如下图 10 平面直角坐标系中的一个向量：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = 2\boldsymbol{e}_1 + 2\boldsymbol{e}_2 \tag{14}$$

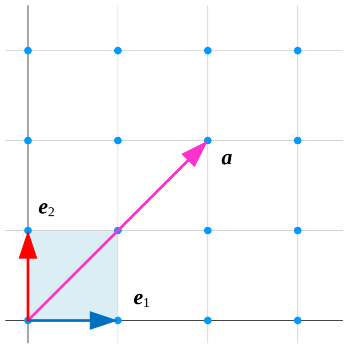


图 10. 平面直角坐标系中的一个向量 $\boldsymbol{a}$

在图 10 这个正交标准坐标系中，$\boldsymbol{a}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \tag{15}$$

其中，x_1 和 x_2 为坐标值。

由于 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2]$ 为单位矩阵，因此 (15) 可以写成：

$$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{16}$$

图 11 给出的是不同基底中表达同一个向量 $\boldsymbol{a}$。

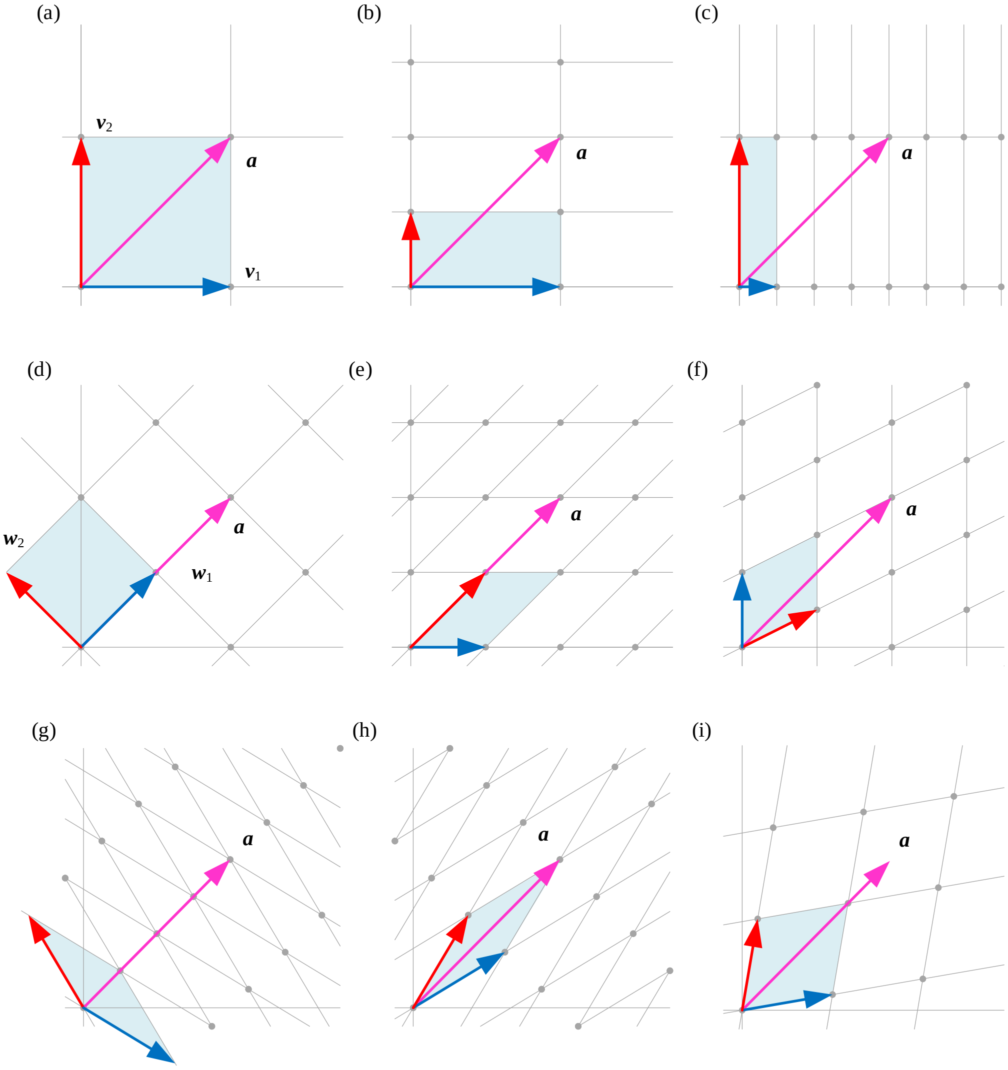


图 11. 不同基底表达同一个向量 $\boldsymbol{a}$

假设在平面上，另外一组基底为 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$，而在这个基底下某个向量 $\boldsymbol{a}$ 的坐标为 $[z_1, z_2]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{a}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{a} = z_1\boldsymbol{v}_1 + z_2\boldsymbol{v}_2 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \tag{17}$$

令，

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \tag{18}$$

(17) 可以写成：

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{z} \tag{19}$$

联立 (16) 和 (19)，得到：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{z} \tag{20}$$

$\boldsymbol{z} = [z_1, z_2]^{\mathrm{T}}$ 可以写成：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x} \tag{21}$$

以 图 11 (a) 为例，$\boldsymbol{V}$ 为：

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{22}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 在图 11 (a) $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 这个基底下的坐标为：

$$\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{23}$$

图 11 (d) 中 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 具体数值为：

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}_1 & \boldsymbol{w}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{24}$$

向量 $\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{W}$、$\boldsymbol{y}$ 三者关系如下：

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{y} \tag{25}$$

向量 $\boldsymbol{a}$ 在图 11 (d) 这个 $[\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2]$ 这个基底下的坐标为：

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{26}$$

联立 (19) 和 (25)，得到：

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{y} \tag{27}$$

这样从坐标 $\boldsymbol{z}$ 到坐标 $\boldsymbol{y}$ 的转换，可以通过下式完成。

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{z} \tag{28}$$

投影

如图 12 (a) 所示，线性无关 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 张成一个二维平面 $H = \mathrm{span}(\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2)$，$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 是 H 的基底。在二维平面 H 内，$\hat{\boldsymbol{a}}$ 用 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 表示：

$$\hat{\boldsymbol{a}} = \alpha_1\boldsymbol{v}_1 + \alpha_2\boldsymbol{v}_2 \tag{29}$$

$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \hat{\boldsymbol{a}}]$ 线性相关。α_1 和 α_2 则是在基底 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2]$ 中的坐标。

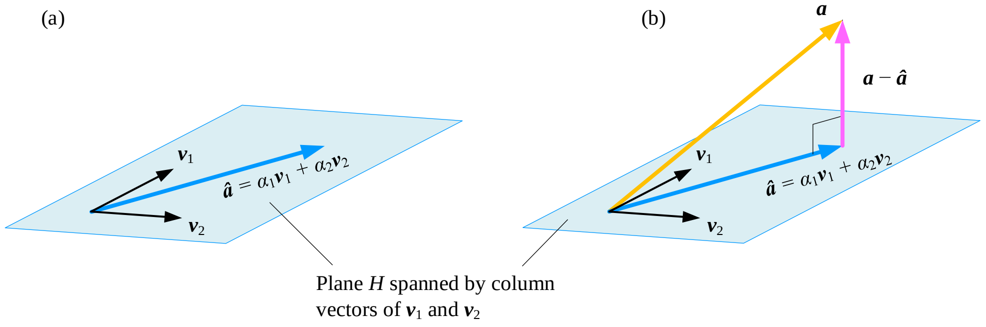


图 12. 线性相关与线性无关，三维空间

图 12 (b) 中，$\boldsymbol{a}$ 明显在平面 H 之外，因此不能用 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 表示，从而 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{a}]$ 线性无关。

如果，$\hat{\boldsymbol{a}}$ 是 $\boldsymbol{a}$ 在 H 平面内投影，$\boldsymbol{a}$ 中不能被 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 表达部分，即 $\boldsymbol{a} - \hat{\boldsymbol{a}}$，垂直于 H 平面。这一思路便是**最小二乘法** (ordinary least square, OLS) 线性回归。

大家也可以顺便回顾一下本系列丛书《数学要素》中鸡兔同笼三部曲中“平面升起的毛绒兔耳朵”和“平面之外的 5 头猪”这两个例子。本书后文还会从几个不同角度讲解投影。

大家读完本节，如果对于向量空间的概念还是云里雾里，下面我们给这个空间涂个颜色，来进一步帮助大家理解！

6.2 给向量空间涂颜色：RGB 色卡

向量空间的“空间”二字赋予这个线性代数概念更多的可视化的潜力。本节开始就试图给向量空间涂“颜色”，让大家从色彩角度来讲解向量空间。

如图 13 所示，**三原色光模式** (RGB color mode) 将**红** (Red)、**绿** (Green)、**蓝** (Blue) 三原色的色光以不同的比例叠加合成产生各种色彩光。

强调一下，它们不是调色盘的涂料。RGB 中，红、绿、蓝均匀调色得到白色；而在调色盘中，红、绿、蓝三色颜料均匀调色得到黑色。

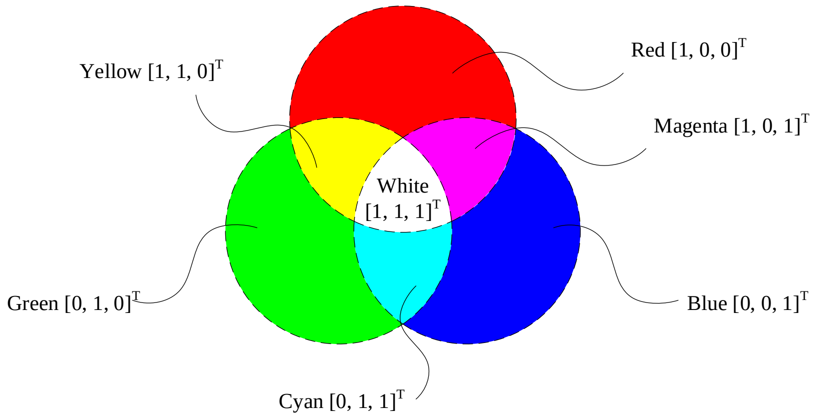


图 13. 三原色模型

如图 14 所示，三原色模型这个空间中，任意一个颜色看成是基底向量 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 构成线性组合：

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{30}$$

其中，$\boldsymbol{e}_1$ 代表红色，$\boldsymbol{e}_2$ 代表绿色，$\boldsymbol{e}_3$ 代表蓝色。

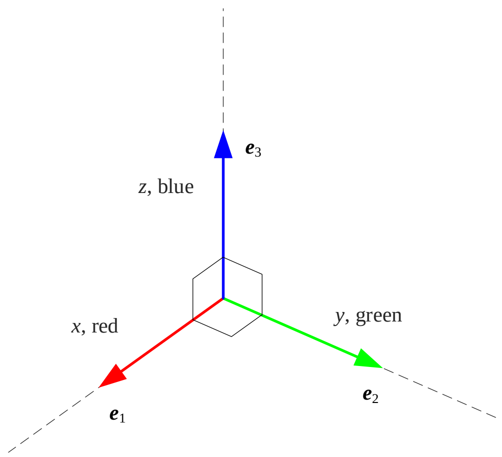


图 14. 三原色空间

也就是各种颜色可以写成如下线性组合：

$$\alpha_1 \boldsymbol{e}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{e}_2 + \alpha_3 \boldsymbol{e}_3 \tag{31}$$

其中，α_1、α_2、α_3 取值范围都是 [0, 1]。

注意，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 这三个基底向量两两正交，因此它们两两内积为 0：

$$e_1 \cdot e_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0, \quad e_1 \cdot e_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0, \quad e_2 \cdot e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \tag{32}$$

而且，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 均为单位向量：

$$\|\boldsymbol{e}_1\|_2 = 1, \quad \|\boldsymbol{e}_2\|_2 = 1, \quad \|\boldsymbol{e}_3\|_2 = 1 \tag{33}$$

因此，在三原色模型这个向量空间 V 中，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 是 V 的标准正交基。

特别强调一点，准确来说，RGB 三原色空间并不是本书前文所述的向量空间，原因就是 α_1、α_2、α_3 有取值范围限制。而向量空间不存在这样的取值限制。

利用 $\boldsymbol{e}_1$ ($[1, 0, 0]^T$ red)、$\boldsymbol{e}_2$ ($[0, 1, 0]^T$ green) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($[0, 0, 1]^T$ blue) 这三个基底向量可以张成一个色彩斑斓的空间。下面我们就带大家揭秘这个彩色空间。

6.3 张成空间：线性组合红、绿、蓝三原色

本节把“张成”这个概念用到 RGB 三原色上。

单色

下面对 $\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 对逐个研究。实数 α_1 取值范围为 $[0, 1]$，α_1 乘 $\boldsymbol{e}_1$ 得到向量 $\boldsymbol{a}$：

$$\boldsymbol{a} = \alpha_1 \boldsymbol{e}_1 \tag{34}$$

大家试想，在这个 RGB 三原色空间，(34) 意味着什么？

图 15 已经给出答案。

标量 α_1 乘向量 $\boldsymbol{e}_1$，得到不同深度的红色。$\boldsymbol{e}_1$ 张成的空间 span($\boldsymbol{e}_1$) 的维度为 1。向量空间 span($\boldsymbol{e}_1$) 是 RGB 三原色空间 V 子空间。

类似地，标量 α_2 乘向量 $\boldsymbol{e}_2$，得到不同深度的绿色。标量 α_3 乘向量 $\boldsymbol{e}_3$，得到不同深度的蓝色。

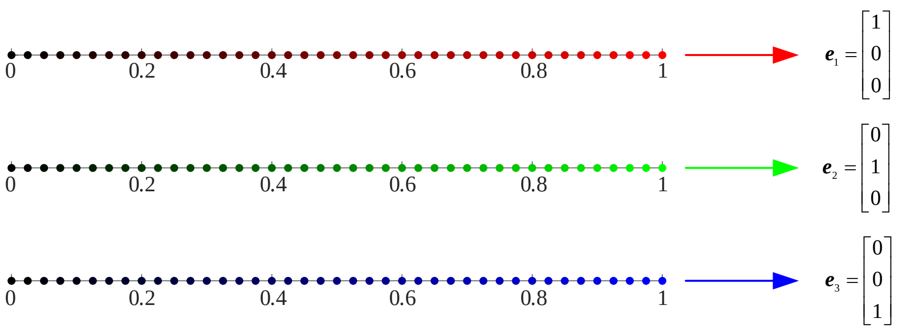


图 15. 三个基底向量和标量乘积

双色合成

再进一步，图 16 所示为 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 的张成空间 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$)。图 16 平面上的颜色可以写成如下线性组合：

$$\boldsymbol{a} = \alpha_1 \boldsymbol{e}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{e}_2 \tag{35}$$

span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 的维数为 2。[$\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$] 的秩为 2。

如图 16 所示，这个 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 平面上，颜色在绿色和红色之间渐变。特别地，$\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$ 为黄色，$\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2$ 在空间 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 中。span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$) 也是 RGB 三原色空间 V 子空间。

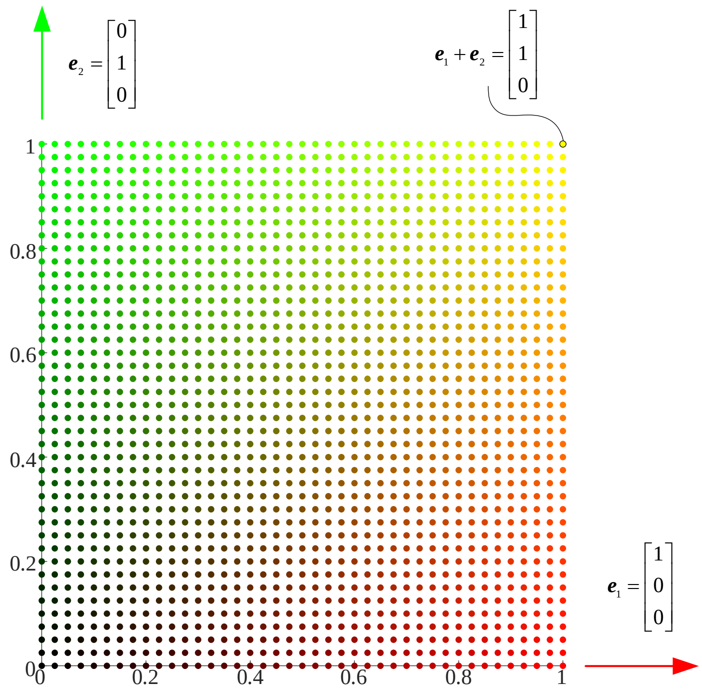


图 16. 基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 张成的空间

图 17 所示为 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 的张成 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_3$)，颜色在蓝色和红色之间渐变。特别地，$\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_3$ 为品红。

图 18 所示为 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 的张成 span($\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$)，颜色在绿色和蓝色之间渐变。注意 $\boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3$ 为青色。

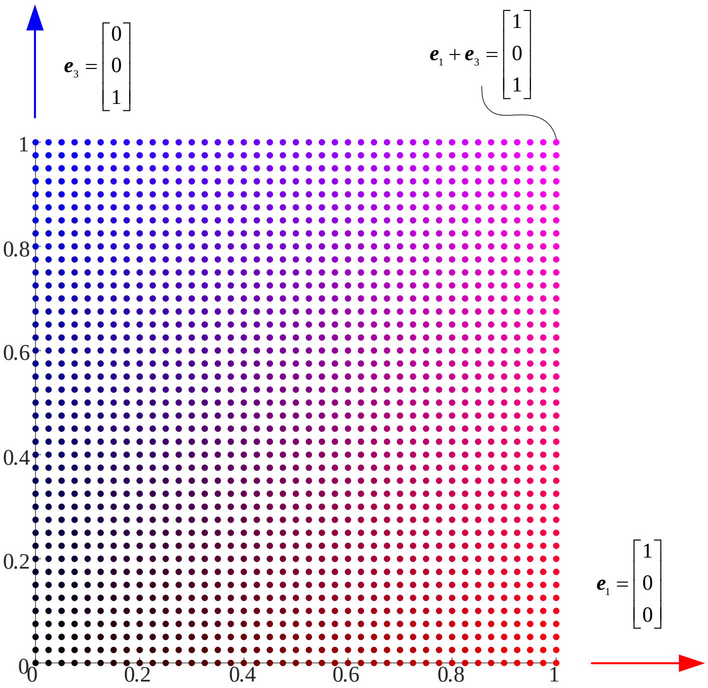


图 17. 基底向量 e_1 和 e_3 张成的空间

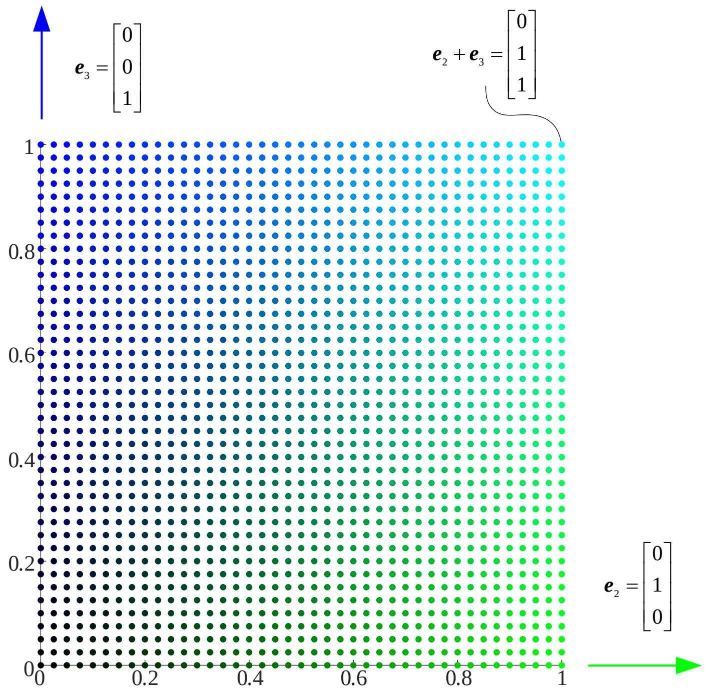


图 18. 基底向量 e_2 和 e_3 张成的空间

三色合成

$\boldsymbol{e}_1$ ($[1, 0, 0]^T$ red)、$\boldsymbol{e}_2$ ($[0, 1, 0]^T$ green) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ($[0, 0, 1]^T$ blue) 这三个基底向量张的空间 span($\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$) 如图 19 所示。这个空间的维数为 3。

注意，为了方便可视化，图 19 仅仅绘制了空间边缘上色彩最鲜艳的散点；实际上，空间内部还有无数散点，代表相对较深的颜色。

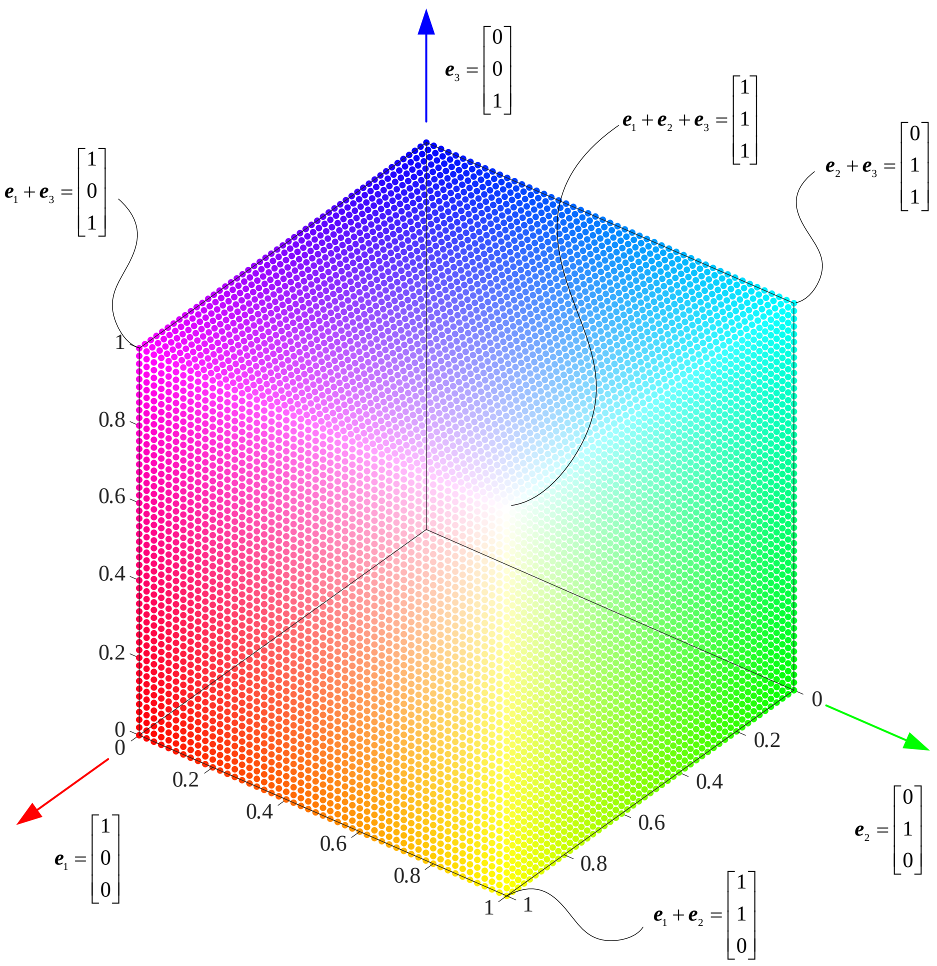


图 19. 三原色张成的彩色空间

三色均匀混合

一种特殊情况，$\boldsymbol{e}_1$、$\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 这三个基底向量以均匀方式混合，得到的便是灰度：

$$\alpha\left(\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3\right) \tag{36}$$

如图 20 所示。其中，白色和黑色分别对应如下向量：

$$1\times(\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3)=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix},\quad 0\times(\boldsymbol{e}_1+\boldsymbol{e}_2+\boldsymbol{e}_3)=\begin{bmatrix}0\\0\\0\end{bmatrix} \tag{37}$$

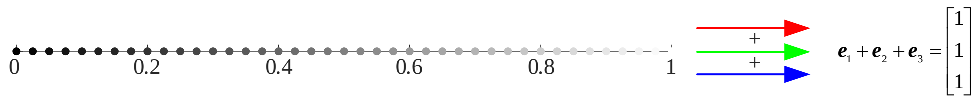


图 20. 灰度

6.4 线性无关：红色和绿色，调不出青色

下面，我们还是用三原色做例子来谈一下线性相关和线性无关。

如图 21 所示，$\boldsymbol{e}_1$ (红色) 和 $\boldsymbol{e}_2$ (绿色) 张成平面 H_1 内的向量 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 与 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性相关；因为，$\hat{\boldsymbol{a}}$ 可以用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性组合：

$$\hat{\boldsymbol{a}}=\alpha_1\boldsymbol{e}_1+\alpha_2\boldsymbol{e}_2 \tag{38}$$

但是，图 21 中有一个跳出平面 H_1 的向量 $\boldsymbol{a}$。

显然，向量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性无关，因为 $\boldsymbol{a}$ 不能用 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 线性组合构造。从色彩角度，红光和绿光，调不出青色光。

向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 差在竖直方向的一束蓝光 $\boldsymbol{a}-\hat{\boldsymbol{a}}$。也就是，$\boldsymbol{a}$ 比 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 多了一抹蓝光。

青色的向量 $\boldsymbol{a}$ 在红绿色构成的平面 H_1 内的投影为 $\hat{\boldsymbol{a}}$。$\boldsymbol{a}-\hat{\boldsymbol{a}}$ 垂直 H_1。

图 22 所示为基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_2，向量 $\boldsymbol{b}$ 向 H_2 投影。图 23 所示为基底向量 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_3，向量 $\boldsymbol{c}$ 向 H_3 投影。

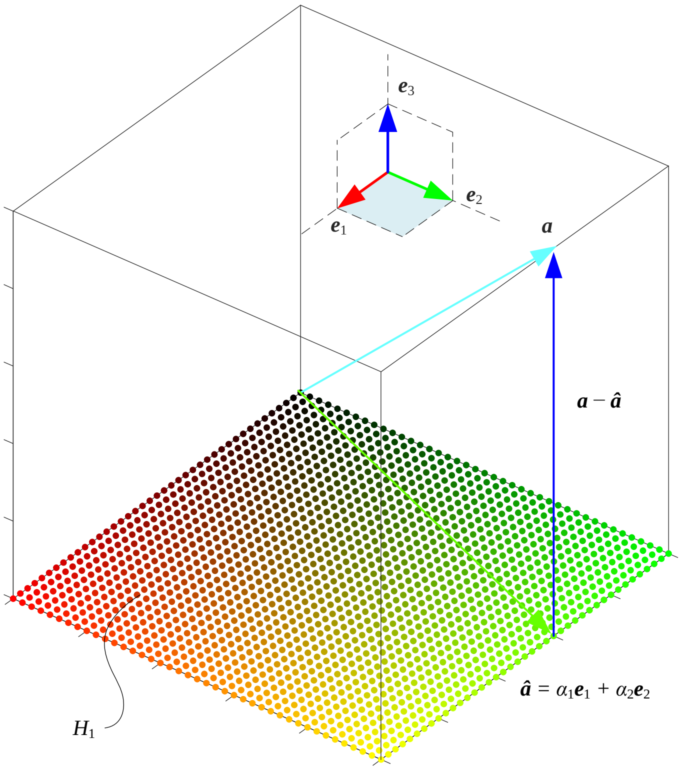


图 21. 基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_2$ 张成平面 H_1，向量 $\boldsymbol{a}$ 向 H_1 投影

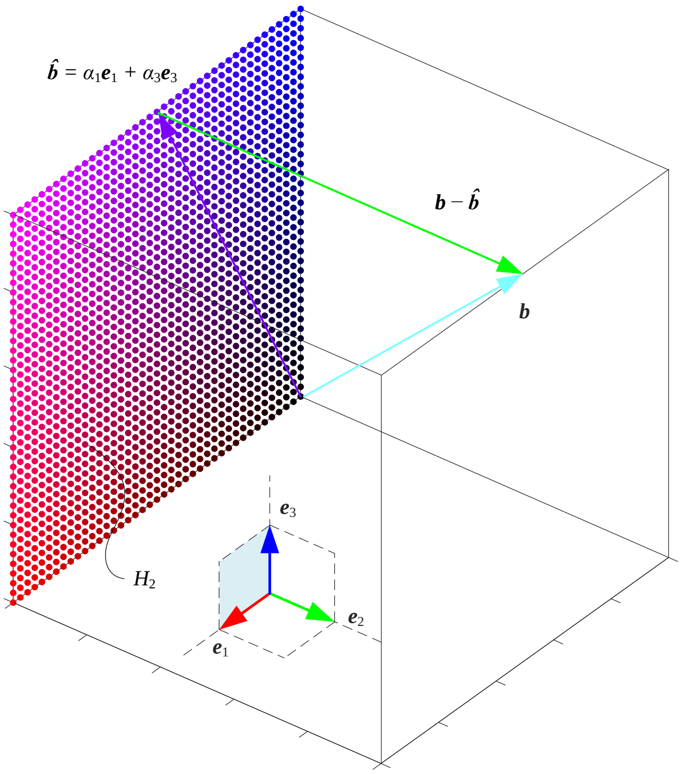


图 22. 基底向量 $\boldsymbol{e}_1$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_2，向量 $\boldsymbol{b}$ 向 H_2 投影

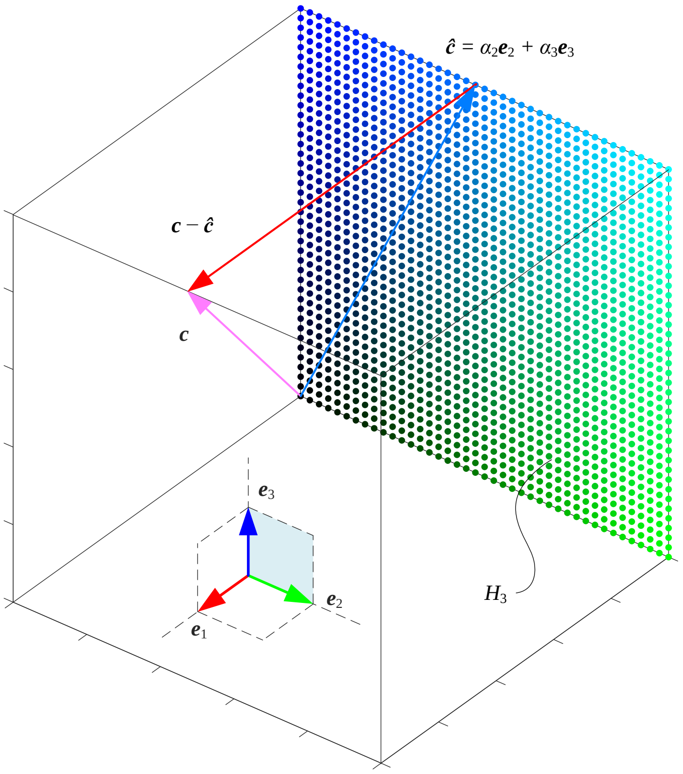


图 23. 基底向量 $\boldsymbol{e}_2$ 和 $\boldsymbol{e}_3$ 张成平面 H_3，向量 $\boldsymbol{c}$ 向 H_3 投影

6.5 非正交基底：青色、品红、黄色

$\boldsymbol{e}_1$ ([1, 0, 0]$^\text{T}$ red)、$\boldsymbol{e}_2$ ([0, 1, 0]$^\text{T}$ green) 和 $\boldsymbol{e}_3$ ([0, 0, 1]$^\text{T}$ blue) 这三个基底向量任意两个组合构造三个向量 $\boldsymbol{v}_1$ ([0, 1, 1]$^\text{T}$ cyan)、$\boldsymbol{v}_2$ ([1, 0, 1]$^\text{T}$ magenta) 和 $\boldsymbol{v}_3$ ([1, 1, 0]$^\text{T}$ yellow)：

$$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_2 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_3 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{39}$$

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 也可以是三维彩色空间基底向量。

印刷四分色模式 (CMYK color model) 就是基于 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 这三个基底向量。CMYK 四个字母分别指的是**青色** (cyan)、**品红** (magenta)、**黄色** (yellow) 和**黑色** (black)。本节，我们只考虑三个彩色，即青色、品红和黄色。

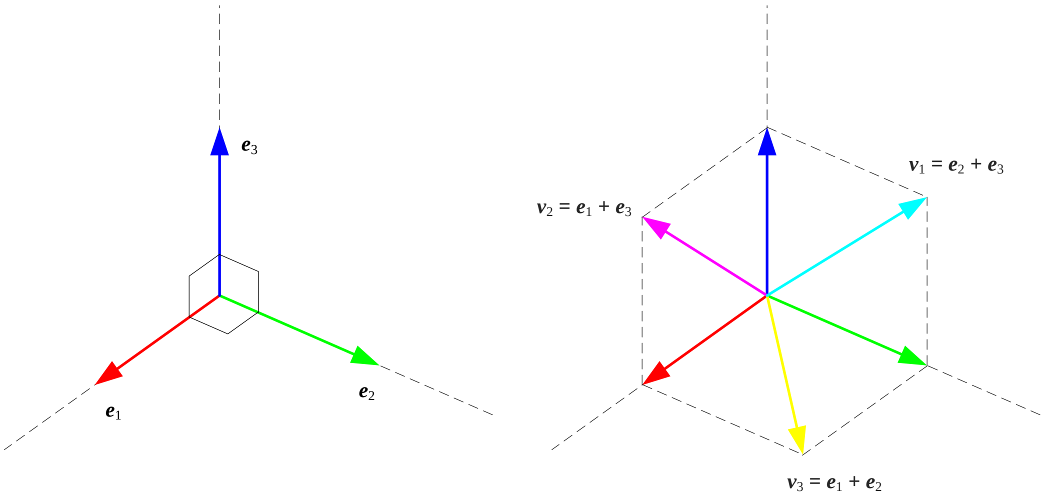


图 24. 正交基底到非正交基底

非正交基底

$\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 并非正交。经过计算可以发现 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 两两夹角均为 60°:

$$
\begin{aligned}
\cos\theta_{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2} &= \frac{\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_2}{\|\boldsymbol{v}_1\|\|\boldsymbol{v}_2\|} = \frac{1}{\sqrt{2}\times\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\
\cos\theta_{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_3} &= \frac{\boldsymbol{v}_1 \cdot \boldsymbol{v}_3}{\|\boldsymbol{v}_1\|\|\boldsymbol{v}_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2}\times\sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\
\cos\theta_{\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3} &= \frac{\boldsymbol{v}_2 \cdot \boldsymbol{v}_3}{\|\boldsymbol{v}_2\|\|\boldsymbol{v}_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2}\times\sqrt{2}} = \frac{1}{2}
\end{aligned}
\tag{40}
$$

也就是 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 为非正交基底。

单色

图 25 所示为 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 各自张成的空间 span($\boldsymbol{v}_1$)、span($\boldsymbol{v}_2$)、span($\boldsymbol{v}_3$)。这三个空间的维数均为 1。

观察图 25 颜色变化，可以发现 span($\boldsymbol{v}_1$)、span($\boldsymbol{v}_2$)、span($\boldsymbol{v}_3$) 分别代表着青色、品红和黄色颜色深浅变化。

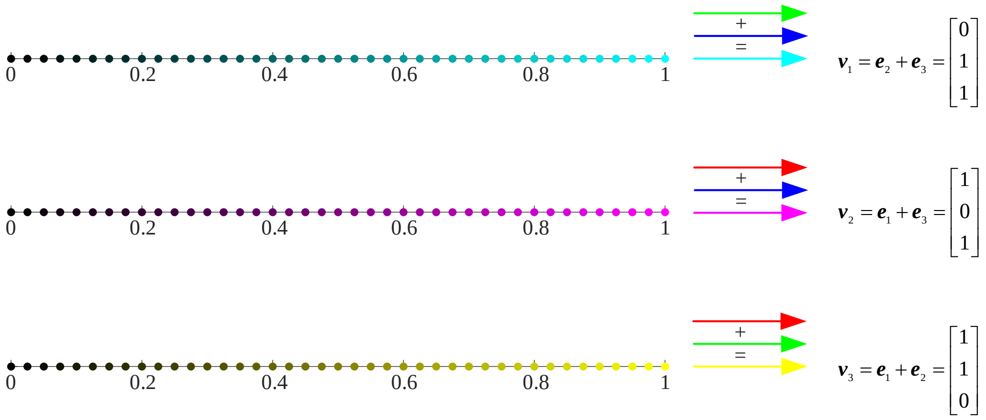


图 25. 单色子空间

双色合成

图 26 ~ 图 28 分别所示为 $\boldsymbol{v}_1$、$\boldsymbol{v}_2$ 和 $\boldsymbol{v}_3$ 两两张成的三个空间 span($\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$)、span($\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_3$)、span($\boldsymbol{v}_2$, $\boldsymbol{v}_2$)。这三个空间的维数都是 2， 它们也都是三色空间的子空间。

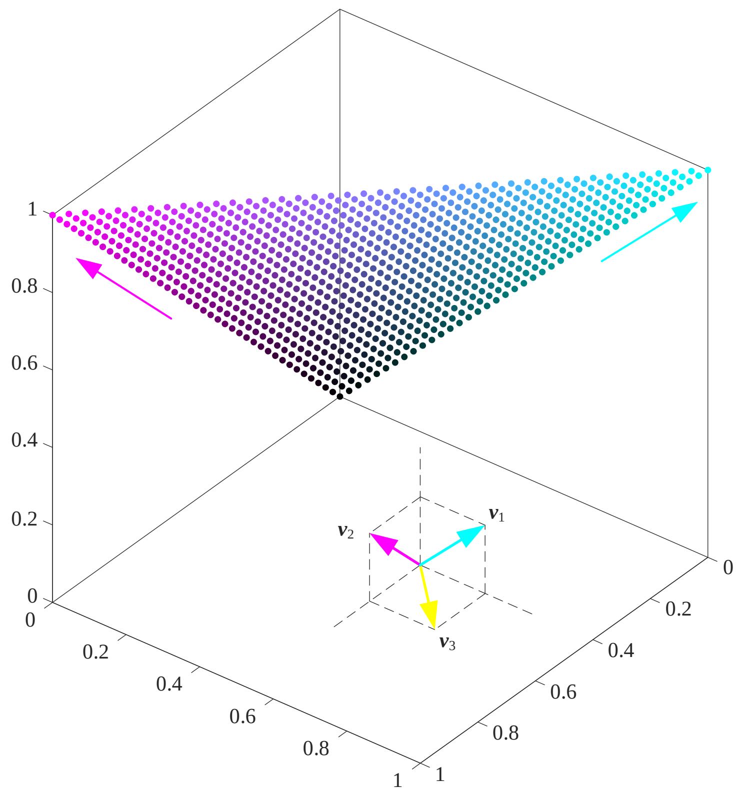


图 26. 基底向量 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 张成的子空间

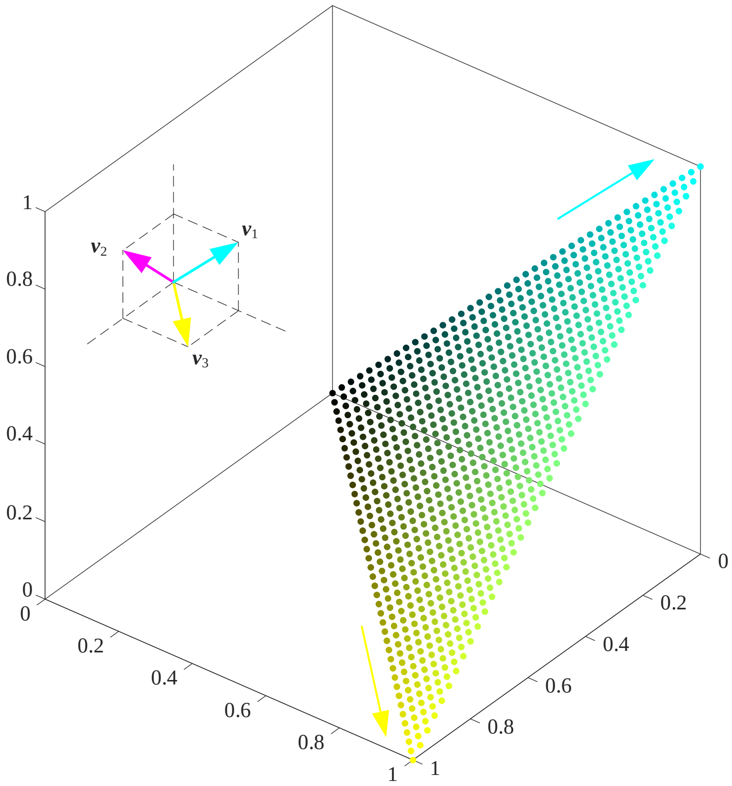


图 27. 基底向量 v_1 和 v_3 张成的子空间

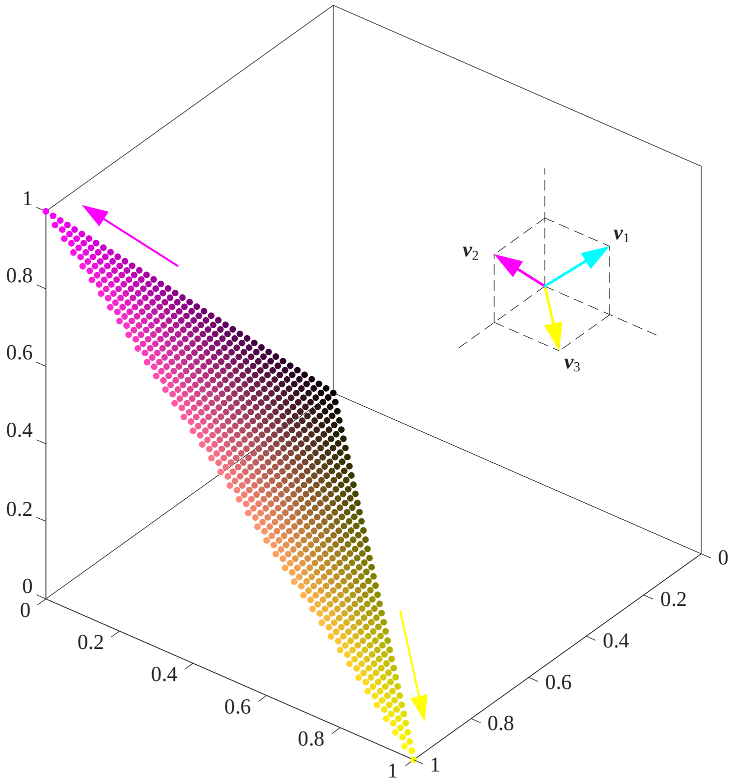


图 28. 基底向量 v_2 和 v_3 张成的子空间

6.6 基底转换：从红、绿、蓝，到青色、品红、黄色

RGB 色卡中，$[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 是空间的基底。CMYK 色卡中，$[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 也是空间的基底。RGB 模式向 CMYK 模式转换叫做**基底转换** (change of basis)。

下式中，通过矩阵 $\boldsymbol{A}$，基底向量 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 转化为基底向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$：

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{v}_3 \end{bmatrix} = \boldsymbol{A} \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \end{bmatrix} \tag{41}$$

$\boldsymbol{A}$ 常被称作过渡矩阵，或转移矩阵 (transition matrix)。

将具体数值代入 (41)，得到：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{A} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{42}$$

即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{43}$$

从基底向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 向 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 转换，可以通过 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 完成：

$$\boldsymbol{A}^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 & \boldsymbol{v}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \end{bmatrix} \tag{44}$$

通过计算可得到 $\boldsymbol{A}^{-1}$：

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{bmatrix} -0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & -0.5 \end{bmatrix} \tag{45}$$

图 29 所示为基底向量 $[\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3]$ 和基底向量 $[\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3]$ 相互转换关系。

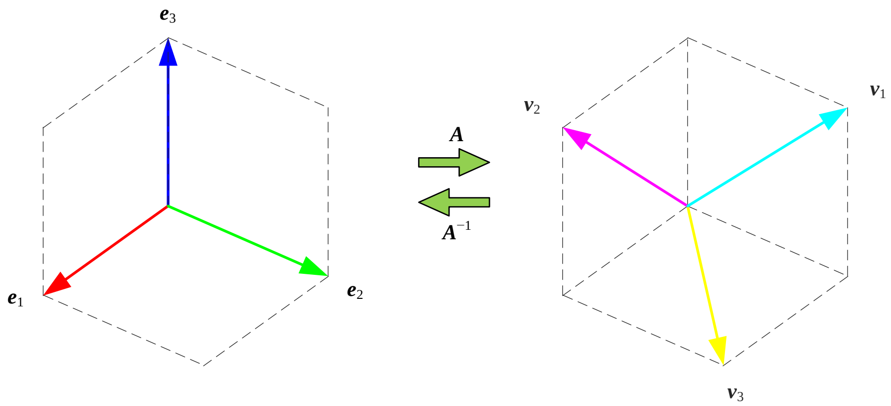


图 29. 基底向量 $[e_1, e_2, e_3]$ 和基底向量 $[v_1, v_2, v_3]$ 相互转换

本章讲解的线性代数概念很多，必须承认它们都很难理解。所以为了帮助大家理解这些概念，我们用 RGB 三原色作为例子，给向量空间涂颜色！

我选出以下四副图片总结本章主要内容。所有的基底向量中，标准正交基和规范正交基这两个概念最常用。请大家注意，它们和本书后续要讲的正交矩阵的联系。平面上，线性相关和线性无关就是看向量是否重合。投影是本书非常重要的几何概念，我们会反复利用这个概念。

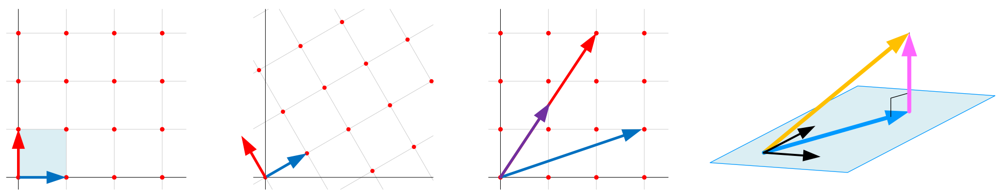


图 30. 总结本章重要内容的四副图