



Vector Space

向量空间

用三原色给向量空间涂颜色



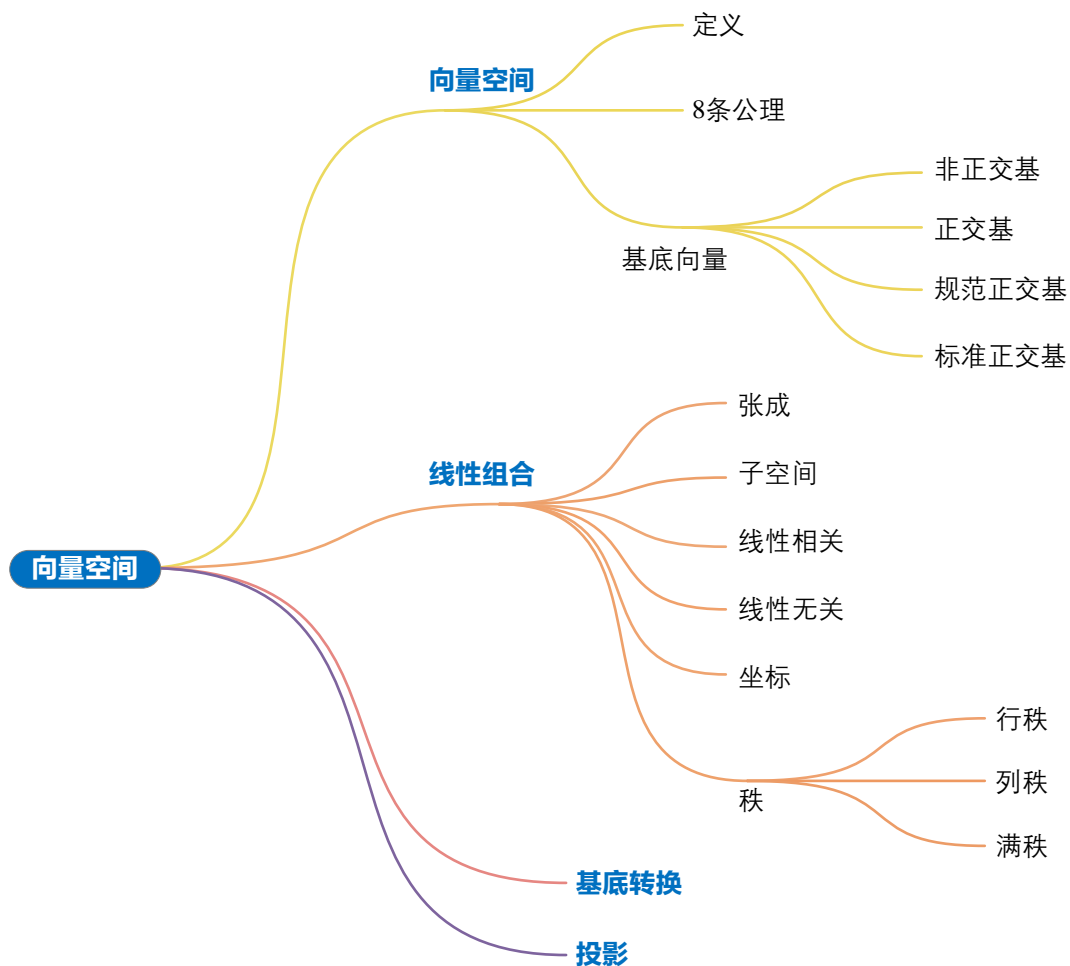
数学，是神灵创造宇宙的语言。

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



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

7.1 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，从向量角度来讲， $x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2$ 代表平面 \mathbb{R}^2 上所有的向量。

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

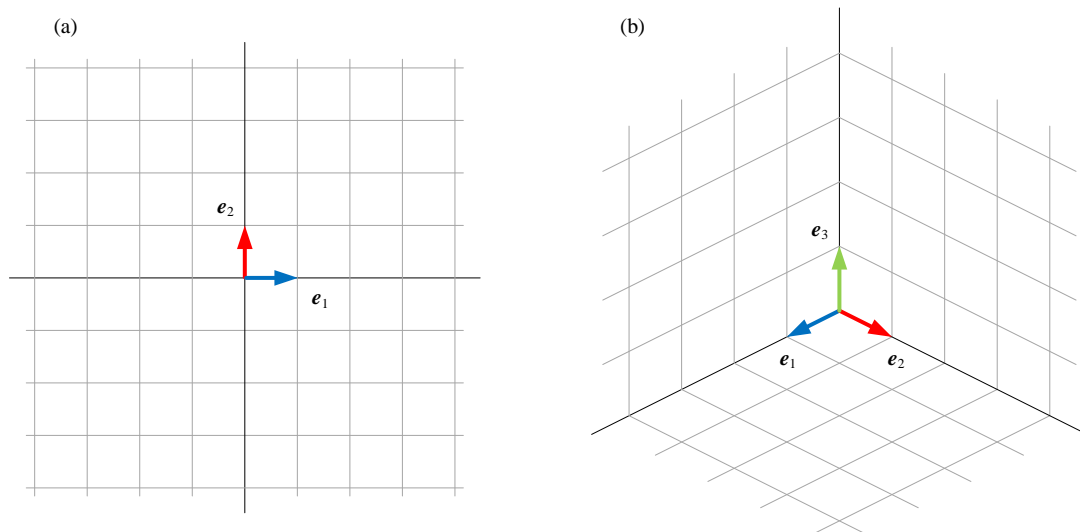


图 1. 二维和三维直角坐标系

向量空间

我们下面看一下向量空间的定义。

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 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} ，可以唯一对应 V 中的一个元素 $\mathbf{u} + \mathbf{v}$ ；而且，对于 V 中的每一个元素 \mathbf{v} 和任意一个标量 k ，可以唯一对应 V 中元素 $k\mathbf{v}$ 。

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 u 和 v ，满足：

$$u + v = v + u \quad (1)$$

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

$$(u + v) + w = u + (v + w) \quad (2)$$

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

$$v + 0 = v \quad (3)$$

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 v ，选在 V 中的另外一个元素 $-v$ ，满足：

$$v + (-v) = 0 \quad (4)$$

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 u 和 v 满足：

$$k(u + v) = ku + kv \quad (5)$$

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 v ，满足：

$$(k + t)v = kv + tv \quad (6)$$

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 v ，满足：

$$(kt)v = k(tv) \quad (7)$$

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

$$1 \cdot v = v \quad (8)$$

注意，以上公理不需要大家格外记忆！

线性组合

令 $v_1, v_2 \dots v_D$ 为向量空间 V 中的向量。下式被称作向量 $v_1, v_2 \dots v_D$ 的**线性组合** (linear combination)。

$$\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_D v_D \quad (9)$$

其中， $\alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_D$ 均为实数。图 2 可视化 (9) 对应的线性组合过程。

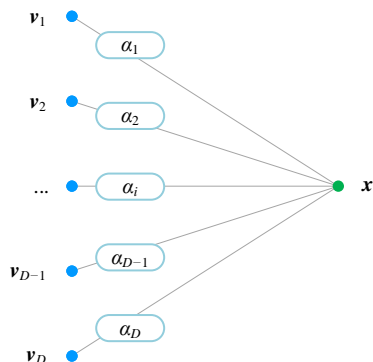


图 2. 线性组合

张成

v_1, v_2, \dots, v_D 所有线性组合的集合称作 v_1, v_2, \dots, v_D 的张成，记做 $\text{span}(v_1, v_2, \dots, v_D)$ 。

线性相关和线性无关

给定向量组 $V = [v_1, v_2, \dots, v_D]$ ，如果存在不全为零 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_D$ 使得下式成立。

$$\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \alpha_3 v_3 + \dots + \alpha_D v_D = \mathbf{0} \quad (10)$$

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

图 3 在平面上解释了线性相关和线性无关。

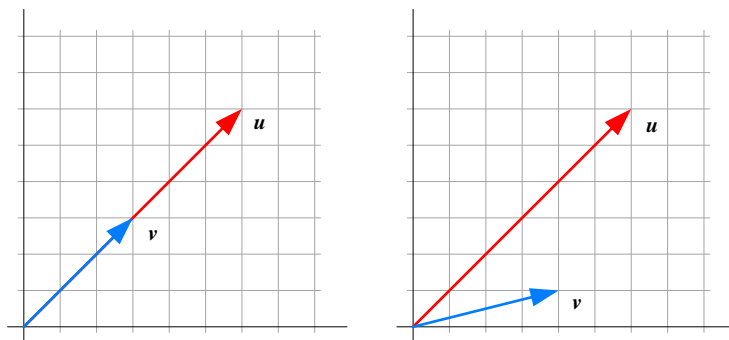


图 3. 平面上解释线性相关与线性无关

极大无关组、秩

一个矩阵 X 的**列秩** (column rank) 是 X 的线性无关的列向量数量最大值。类似地，**行秩** (row rank) 是 X 的线性无关的行向量数量最大值。

以列秩为例，矩阵 X 可以写成一系列列向量：

$$X_{n \times D} = [\mathbf{x}_1 \quad \mathbf{x}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{x}_D] \quad (11)$$

对于 $F = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D\}$ ，如果这些列向量线性相关，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 $S = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r\}$ 线性无关。则称 $S = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_r\}$ 为 $F = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D\}$ 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 $F = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D\}$ 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 X 的秩 (rank)，记做 $\text{rank}(X)$ 。 $\text{rank}(X)$ 小于等于 $\min(D, n)$ ，即 $\text{rank}(X) \leq \min(D, n)$ ；对于“细高型”数据矩阵， $\text{rank}(X) \leq D$ 。

图 4 所示为当 $\text{rank}(X)$ 的秩取不同值时， $\text{span}(X)$ 所代表的空间。矩阵 X 的列数为 D ，当 $\text{rank}(X) = D$ 时，矩阵 X 列满秩，列向量 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D$ 线性无关。

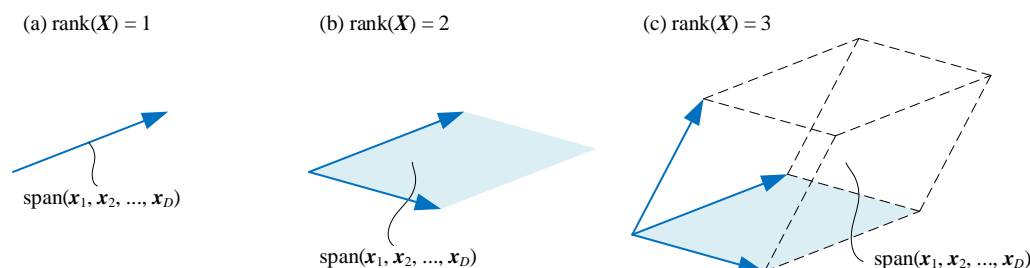


图 4. $\text{rank}(X)$ 的秩和 $\text{span}(X)$ 的空间

⚠ 请读者注意，仅当方阵 $A_{D \times D}$ 满秩，即 $\text{rank}(A) = D$ ， A 可逆。

如果乘积 AB 存在， AB 的秩满足：

$$\text{rank}(AB) \leq \min(\text{rank}(A), \text{rank}(B)) \quad (12)$$

对于实数矩阵 X ，以下几个矩阵的秩相等：

$$\text{rank}(X^T X) = \text{rank}(X X^T) = \text{rank}(X) = \text{rank}(X^T) \quad (13)$$

`numpy.linalg.matrix_rank()` 计算矩阵的秩。

此外，不要被矩阵的形状迷惑，如下矩阵的秩都是 1。

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{10 \times 1}, \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 3 & 4 \end{bmatrix}_{10 \times 4}, [1 \ 2 \ 3 \ 4] \quad (14)$$

基底、基底向量

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

白话说，基底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唯一的经纬度坐标。

这就是本节最开始说的， $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ 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 $x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2$ 。而 (x_1, x_2) 就是在基底 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 下的坐标。

⚠ 注意区别 $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ 和 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 。本书会用 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 表达有序基，也就是向量基底元素按“先 \mathbf{e}_1 后 \mathbf{e}_2 ”顺序排列。而 $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$ 代表集合，集合中基底向量不存在顺序。此外，有序基 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 相当于由向量构造得到一个矩阵 E 。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 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ ，即 \mathbb{R}^2 维数 $\dim(\mathbb{R}^2) = 2$ ，而 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 的秩也是 2。

图 1 (b) 中 $\mathbb{R}^3 = \text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ ，即 \mathbb{R}^3 维数 $\dim(\mathbb{R}^3) = 3$ ， $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ 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 5 所示为 6 个维度为 1 的向量空间。从几何角度来看，这些向量空间都是直线。

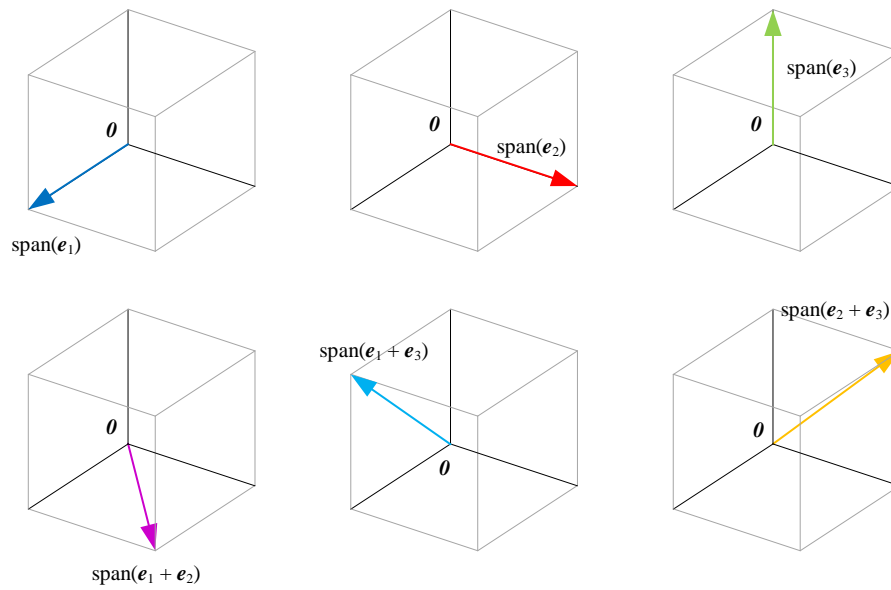


图 5. 维数为 1 的向量空间

图 6 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 6 每幅子图中的两个向量分别是该空间的基底向量。再次强调，基底中的向量必须线性无关。

从集合角度来看， $\text{span}(e_1) \subset \text{span}(e_1, e_2)$ ， $\text{span}(e_2) \subset \text{span}(e_1, e_2)$ 。

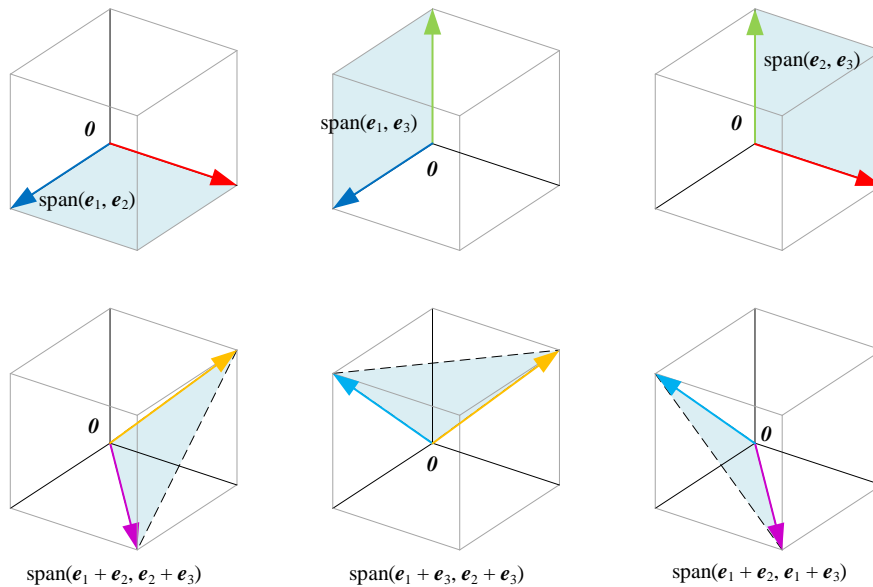


图 6. 维数为 2 的向量空间，张成空间的向量线性无关

图 7 所示为线性相关的向量张起的维数为 2 的空间。

举个例子， $\text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$ 张起的空间维度为 2，显然 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 中向量线性相关，因此 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 不能叫做基底。进一步分析可以知道 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 的秩为 2。

由于基底中的基底向量则必须线性无关，剔除掉其中冗余向量后， $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 、 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 、 $[\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 三组中的任意一组向量都线性无关，因此它们三者都可以选做 $\text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$ 空间的基底。

不同的是， $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 中基底向量正交，但是 $[\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 、 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 这两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。

相信大家已经很清楚，基底中的向量之间必须线性无关，而用 $\text{span}()$ 张成空间的向量可以线性相关，比如 $\text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) = \text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) = \text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + 2\mathbf{e}_2, 2\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$ 。

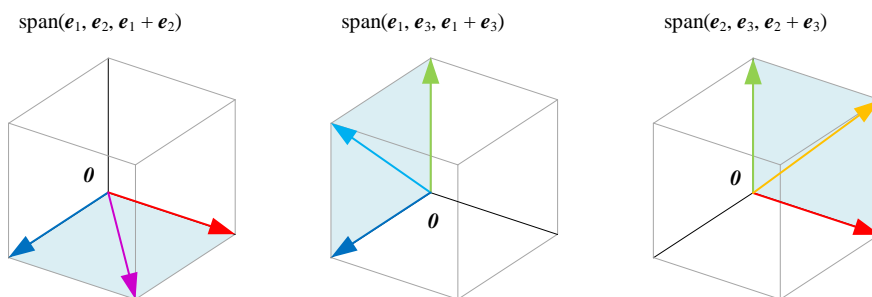


图 7. 维数为 2 的向量空间，张成空间的向量线性相关

图 8 所示为线性无关的向量张起维数为 3 的空间。注意这些空间都和 \mathbb{R}^3 等价。

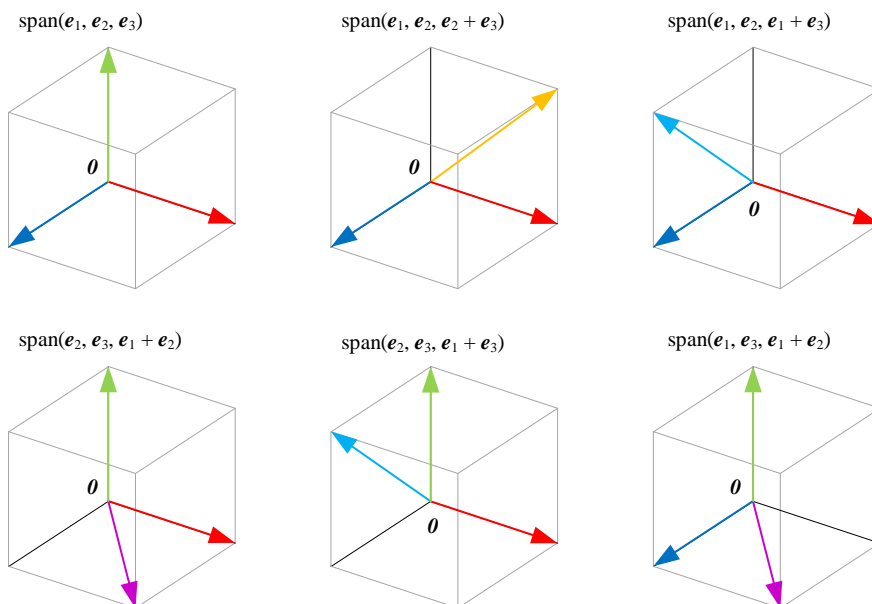


图 8. 维数为 3 的向量空间

过原点、仿射空间

此外，“过原点”这一点对于向量空间极为重要。图 5 所示的几个一维空间（直线）显然过原点；也就是说原点 $\mathbf{0}$ 在向量空间中。几何角度来看，图 6、图 7 所示的维数为 2 的空间是平面，这些平面都过原点。原点 $\mathbf{0}$ 也在图 8 所示的维数为 3 的空间中。

向量空间平移后得到的空间叫做仿射空间 (affine space)，如图 9 所示的三个例子。图 9 所示的三个仿射空间显然都不过原点。下一章，我们将介绍几何变换，大家会接触到仿射变换 (affine transformation)。

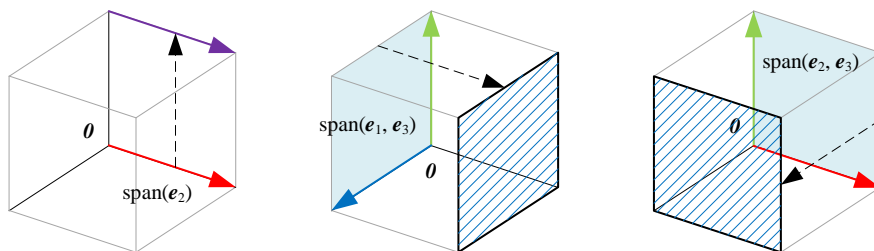


图 9. 向量空间平移得到仿射空间

基底选择并不唯一

此外，我们之所以强调 $[e_1, e_2]$ 是平面 \mathbb{R}^2 的基底，这是因为 $[e_1, e_2]$ 不是平面 \mathbb{R}^2 唯一的基底。

大家还记得本书前文给出图 10 的这幅图吗？

$[e_1, e_2]$ 、 $[v_1, v_2]$ 、 $[w_1, w_2]$ 都是平面 \mathbb{R}^2 基底！也就是说 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(e_1, e_2) = \text{span}(v_1, v_2) = \text{span}(w_1, w_2)$ 。

而平面 \mathbb{R}^2 上的向量 x 在 $[e_1, e_2]$ 、 $[v_1, v_2]$ 、 $[w_1, w_2]$ 这三组基底中都有各自的唯一坐标。

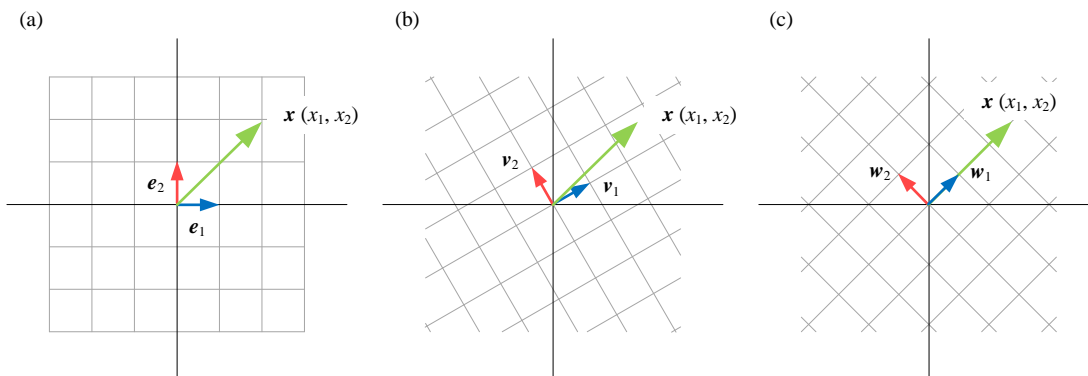


图 10. 向量 x 在三个不同的正交直角坐标系中位置

正交基、规范正交基、标准正交基

大家可能早已注意到图 10 中, $[e_1, e_2]$ 、 $[v_1, v_2]$ 、 $[w_1, w_2]$ 的每个基底向量都是单位向量, $\|e_1\| = \|e_2\| = \|v_1\| = \|v_2\| = \|w_1\| = \|w_2\| = 1$ 。

且每组基底向量本身相互正交, 即 e_1 垂直 e_2 , v_1 垂直 v_2 , w_1 垂直 w_2 。

本书中, 基底中基底向量若两两正交, 该基底叫**正交基** (orthogonal basis)。

如果正交基中每个基底向量的模都为 1, 则称该基底为**规范正交基** (orthonormal basis)。图 10 中 $[e_1, e_2]$ 、 $[v_1, v_2]$ 、 $[w_1, w_2]$ 三组基底都是规范正交基。

显然, 张成平面 \mathbb{R}^2 的规范正交基有无数组。它们之间存在旋转关系, 也就是说 $[e_1, e_2]$ 绕原点旋转一定角度就可以得到 $[v_1, v_2]$ 或 $[w_1, w_2]$ 。

更特殊的是, $[e_1, e_2]$ 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 $[e_1, e_2]$, 是因为用这个基底表示平面 \mathbb{R}^2 最为自然。 $[e_1, e_2]$ 也是平面直角坐标系最普遍的参考系。

显然, $[e_1, e_2, e_3]$ 是 \mathbb{R}^3 的标准正交基, $[e_1, e_2, \dots, e_D]$ 是 \mathbb{R}^D 的标准正交基。

非正交基

基底中的基底向量可以非正交, 我们在图 8 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。如果基底中的基底向量之间两两不都是正交, 这样的基底叫做非正交基 (non-orthogonal basis)。

图 11 所示为两组非正交基底, 它们也都张起 \mathbb{R}^2 平面, 即 $\mathbb{R}^2 = \text{span}(a_1, a_2) = \text{span}(b_1, b_2)$ 。

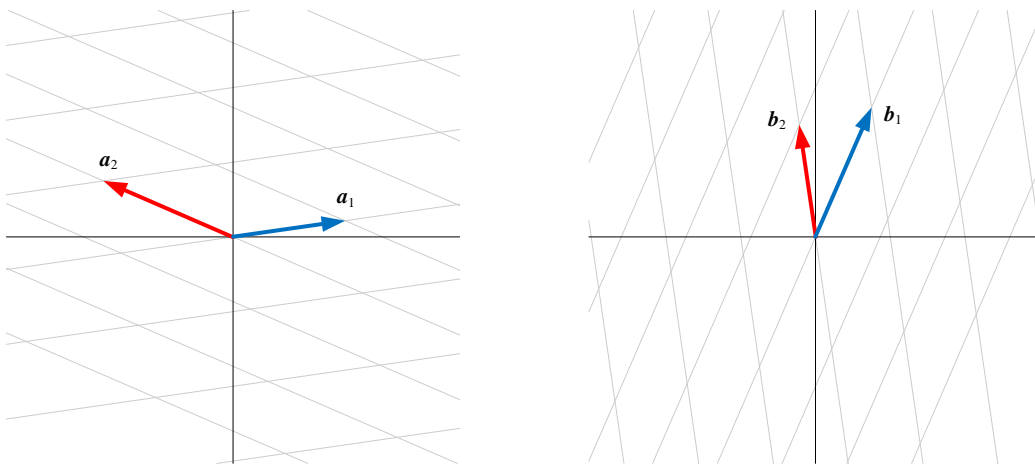


图 11. 二维平面的两个基底, 非正交

图 12 总结了几种基底之间的关系。

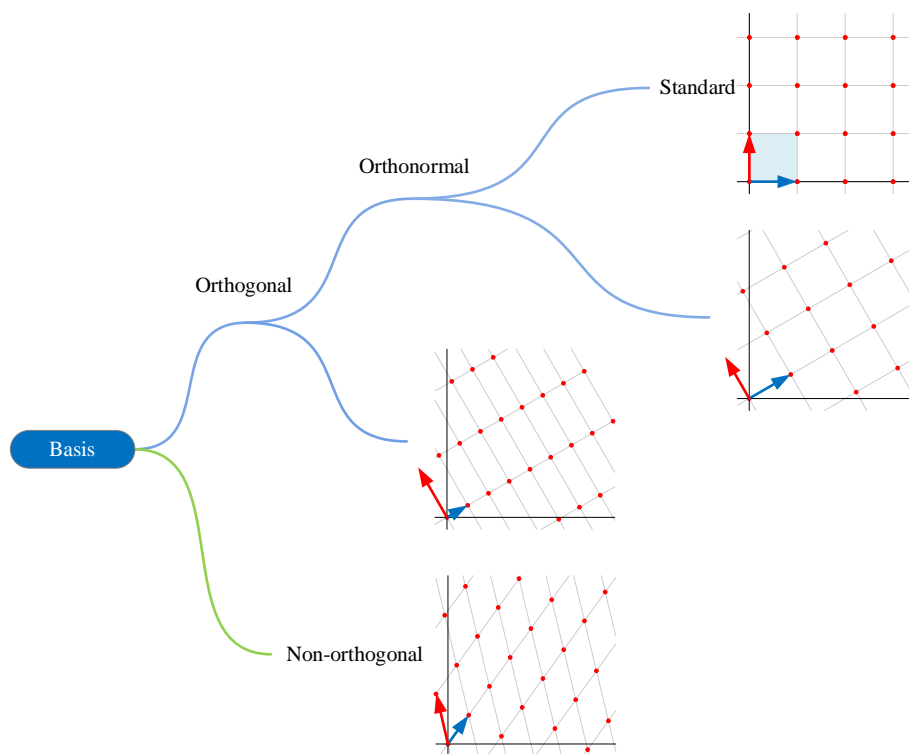


图 12. 几种基底之间的关系

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 13 平面直角坐标系中的一个向量，将其写成 e_1 和 e_2 的线性组合：

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = 2\mathbf{e}_1 + 2\mathbf{e}_2 \quad (15)$$

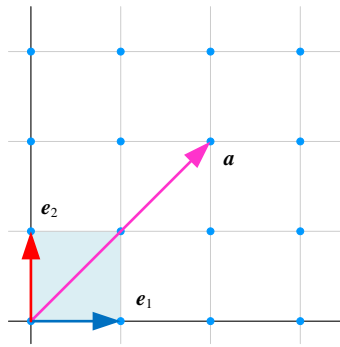
图 13. 平面直角坐标系中的一个向量 a

图 14 给出的是不同基底中表达同一个向量 a 。

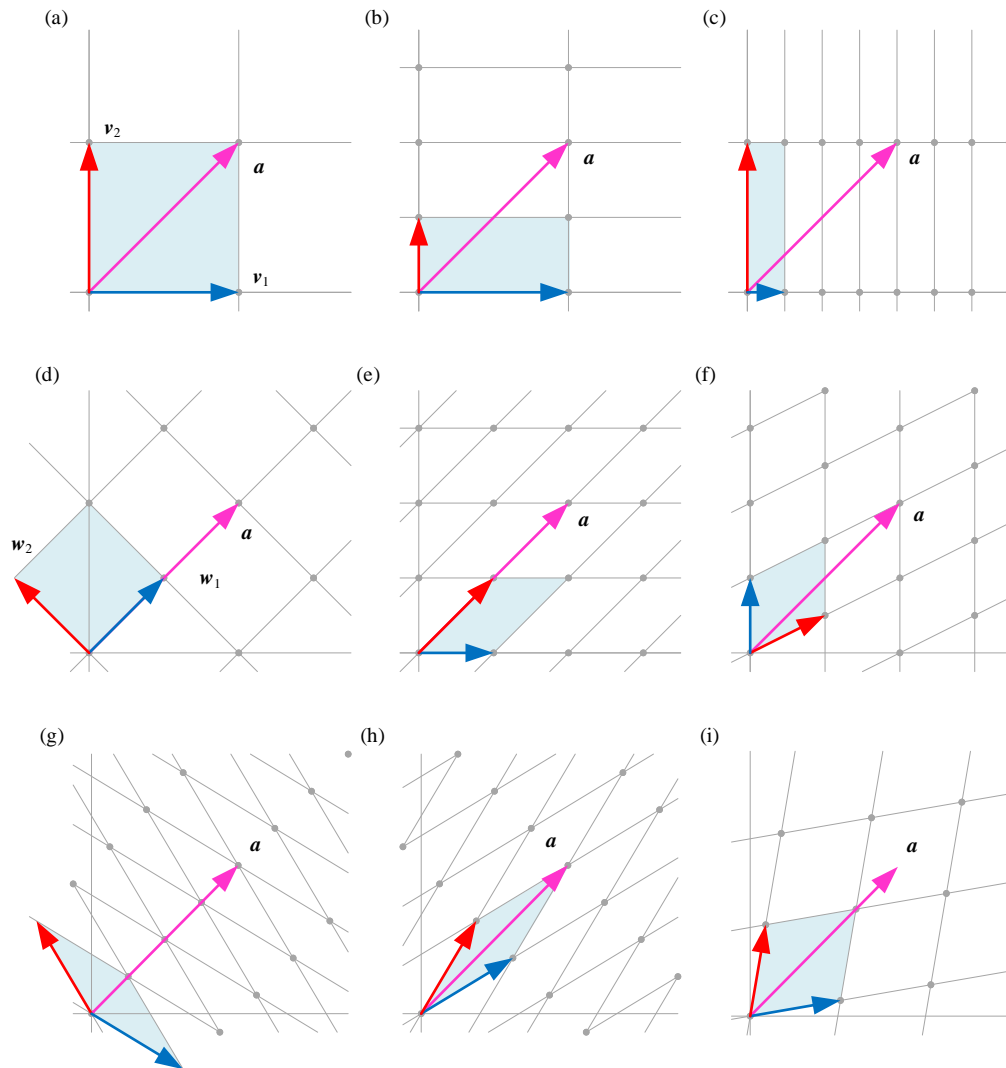


图 14. 不同基底表达同一个向量 \mathbf{a}

在图 13 这个正交标准坐标系中， \mathbf{a} 可以写成列向量 \mathbf{x} ：

$$\mathbf{a} = [\mathbf{e}_1 \quad \mathbf{e}_2] \underset{\mathbf{x}}{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}} = \mathbf{E}\mathbf{x} = \mathbf{x} \quad (16)$$

其中， x_1 和 x_2 代表坐标值。

假设在平面上，另外一组基底为 $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]$ ，而在这个基底向量 \mathbf{a} 的坐标为 $[z_1, z_2]^T$ ， \mathbf{a} 可以写成 \mathbf{v}_1 和 \mathbf{v}_2 的线性组合：

$$\mathbf{a} = z_1\mathbf{v}_1 + z_2\mathbf{v}_2 = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2] \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \quad (17)$$

令，

$$\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2], \quad \mathbf{z} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \quad (18)$$

(17) 可以写成：

$$\mathbf{a} = \mathbf{V}\mathbf{z} \quad (19)$$

联立 (16) 和 (19)，得到：

$$\mathbf{x} = \mathbf{V}\mathbf{z} \quad (20)$$

$\mathbf{z} = [z_1, z_2]^T$ 可以写成：

$$\mathbf{z} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{x} \quad (21)$$

以图 14 (a) 为例， \mathbf{V} 为：

$$\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \quad \mathbf{v}_2] = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (22)$$

向量 \mathbf{a} 在图 14 (a) $[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]$ 这个基底下的坐标为：

$$\mathbf{z} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (23)$$

再举个例子，图 14 (d) 中 $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2]$ 具体数值为：

$$\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1 \quad \mathbf{w}_2] = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (24)$$

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

$$\mathbf{a} = \mathbf{W}\mathbf{y} \quad (25)$$

其中， y 代表向量 a 在中 $[w_1, w_2]$ 坐标。

向量 a 在图 14 (d) 这个 $[w_1, w_2]$ 这个基底下的坐标为：

$$y = W^{-1}x = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (26)$$

联立 (19) 和 (25)，得到：

$$Vz = Wy \quad (27)$$

这样从坐标 z 到坐标 y 的转换，可以通过下式完成。

$$y = W^{-1}Vz \quad (28)$$

代入具体值，得到：

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (29)$$

z y

投影

如图 15 (a) 所示，线性无关的两个向量 v_1 和 v_2 张成一个二维平面 $H = \text{span}(v_1, v_2)$ ， $[v_1, v_2]$ 是 H 的基底。在二维平面 H 内， \hat{a} 为 v_1 和 v_2 的线性组合：

$$\hat{a} = \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 \quad (30)$$

α_1 和 α_2 则是 \hat{a} 在基底 $[v_1, v_2]$ 中的坐标。显然 \hat{a} 、 v_1 、 v_2 线性相关。

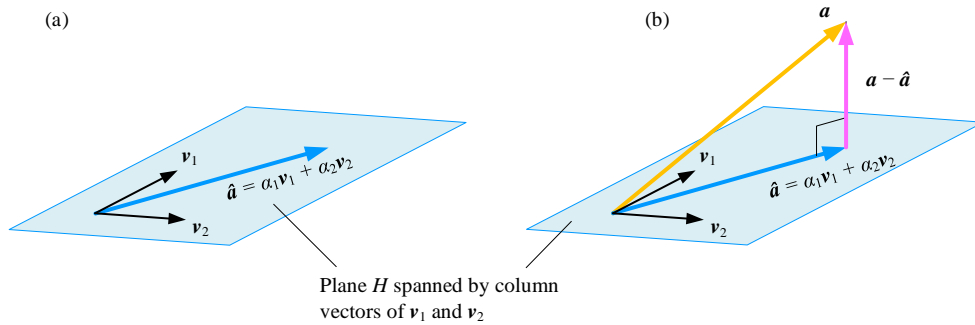


图 15. 线性相关与线性无关，三维空间

图 15 (b) 中， a 明显在平面 H 之外，因此不能用 v_1 和 v_2 线性组合表达，从而 a 、 v_1 、 v_2 线性无关。

如果 \hat{a} 是 a 在 H 平面内投影, a 中不能被 v_1 和 v_2 表达部分, 即 $a - \hat{a}$, 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!

7.2 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 16 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, 红、绿、蓝不是调色盘的涂料。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。

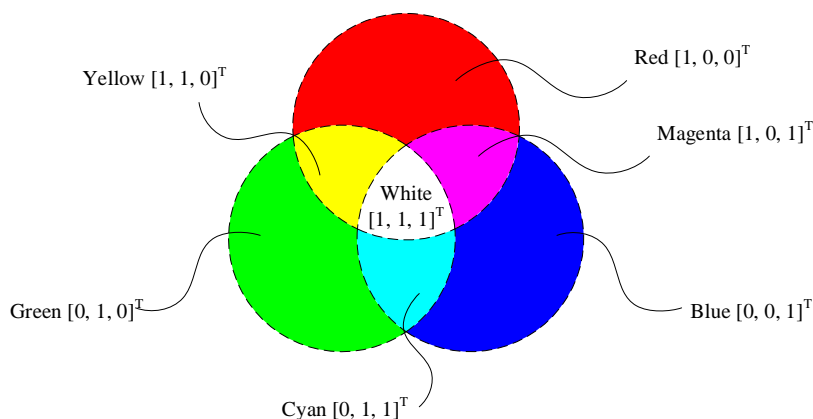


图 16. 三原色模型

如图 17 所示, 三原色模型这个空间中, 任意一个颜色看成是基底 $[e_1, e_2, e_3]$ 中三个基底向量构成线性组合。其中, e_1 代表红色, e_2 代表绿色, e_3 代表蓝色:

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (31)$$

注意，RGB 三原色可以用八进制表示，这时数值为 0 ~ 255 之间整数。也可以十六进制数来表达。

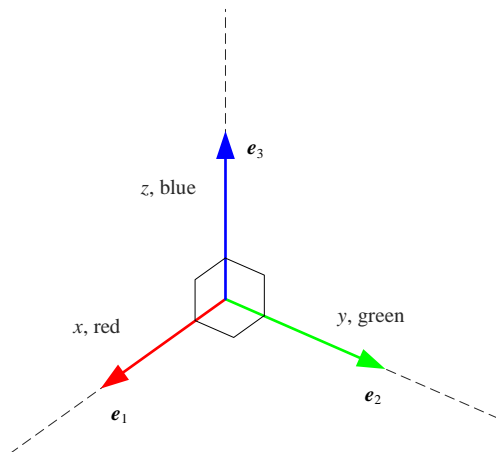


图 17. 三原色空间

也就是说，各种颜色可以写成如下线性组合：

$$\alpha_1 \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \mathbf{e}_2 + \alpha_3 \mathbf{e}_3 \quad (32)$$

其中， α_1 、 α_2 、 α_3 取值范围都是 $[0, 1]$ 。

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

$$\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0, \quad \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0, \quad \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \quad (33)$$

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

$$\|\mathbf{e}_1\|_2 = 1, \quad \|\mathbf{e}_2\|_2 = 1, \quad \|\mathbf{e}_3\|_2 = 1 \quad (34)$$

因此，在三原色模型这个向量空间 V 中， $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$ 是 V 的标准正交基。利用 \mathbf{e}_1 ($[1, 0, 0]^T$ red)、 \mathbf{e}_2 ($[0, 1, 0]^T$ green) 和 \mathbf{e}_3 ($[0, 0, 1]^T$ blue) 这三个基底向量，我们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。

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。

7.3 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

首先，对 e_1 、 e_2 和 e_3 对逐个研究。实数 α_1 取值范围为 $[0, 1]$ ， α_1 乘 e_1 得到向量 a ：

$$a = \alpha_1 e_1 \quad (35)$$

大家试想，在这个 RGB 三原色空间，(35) 意味着什么？

图 18 已经给出答案。

标量 α_1 乘向量 e_1 ，得到不同深度的红色。 e_1 张成的空间 $\text{span}(e_1)$ 的维度为 1。向量空间 $\text{span}(e_1)$ 是 RGB 三原色空间 V 子空间。

类似地，标量 α_2 乘向量 e_2 ，得到不同深度的绿色。标量 α_3 乘向量 e_3 ，得到不同深度的蓝色。图 18 的三个空间的维度都是 1 维。

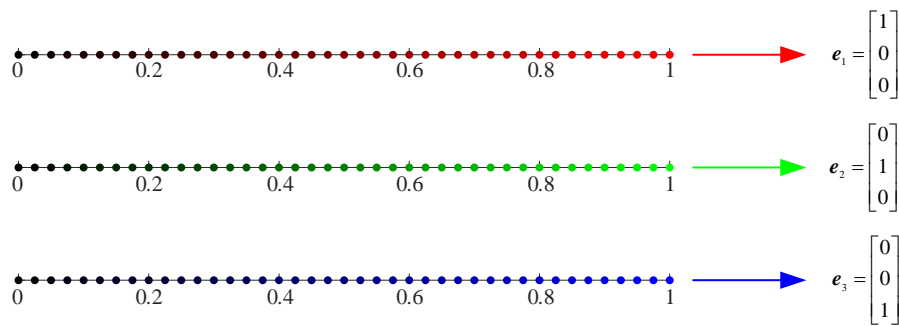


图 18. 三个基底向量和标量乘积

双色合成

再进一步，图 19 所示为 e_1 和 e_2 的张成空间 $\text{span}(e_1, e_2)$ 。图 19 平面上的颜色可以写成如下线性组合：

$$a = \alpha_1 e_1 + \alpha_2 e_2 \quad (36)$$

$\text{span}(e_1, e_2)$ 的维数为 2。 $[e_1, e_2]$ 的秩为 2。

如图 19 所示，这个 $\text{span}(e_1, e_2)$ 平面上，颜色在绿色和红色之间渐变。特别地， $e_1 + e_2$ 为黄色， $e_1 + e_2$ 在空间 $\text{span}(e_1, e_2)$ 中。 $\text{span}(e_1, e_2)$ 也是 RGB 三原色空间 V 子空间。

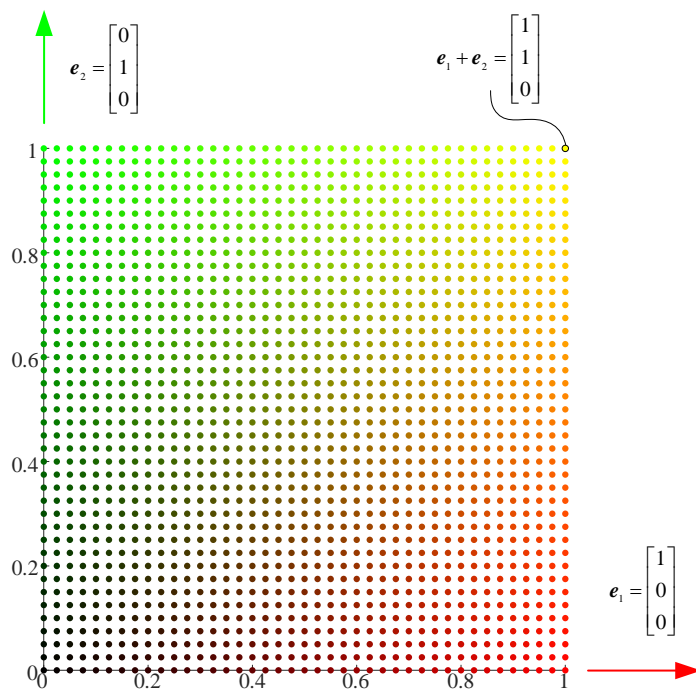
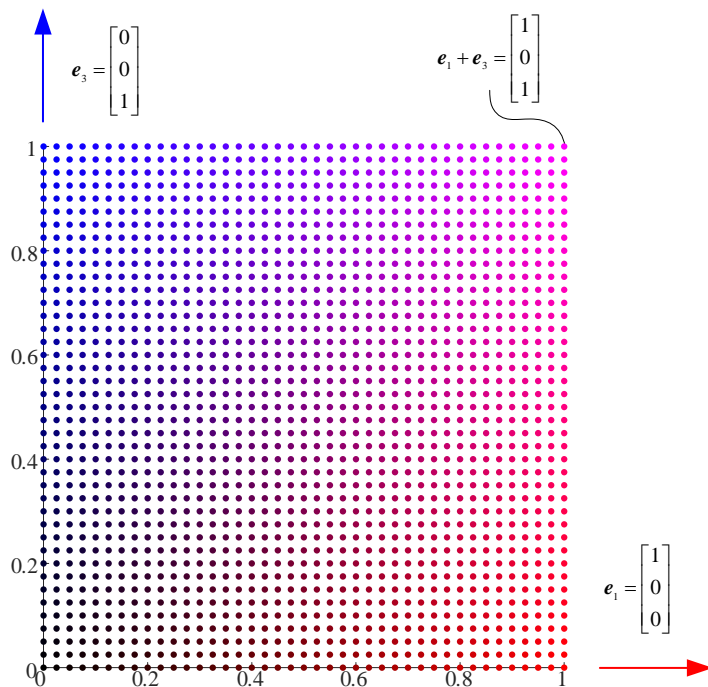
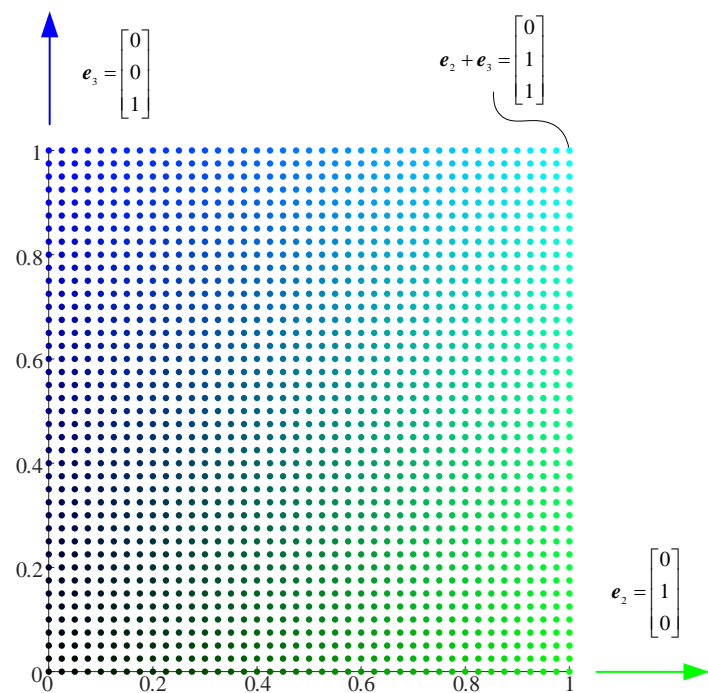
图 19. 基底向量 e_1 和 e_2 张成的空间

图 20 所示为 e_1 和 e_3 的张成 $\text{span}(e_1, e_3)$ ，颜色在蓝色和红色之间渐变。特别地， $e_1 + e_3$ 为品红。

图 21 所示为 e_2 和 e_3 的张成 $\text{span}(e_2, e_3)$ ，颜色在绿色和蓝色之间渐变。注意 $e_2 + e_3$ 为青色。

图 20. 基底向量 e_1 和 e_3 张成的空间图 21. 基底向量 e_2 和 e_3 张成的空间

三色合成

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

e_1 ($[1, 0, 0]^T$ red)、 e_2 ($[0, 1, 0]^T$ green) 和 e_3 ($[0, 0, 1]^T$ blue) 这三个基底向量张的空间 $\text{span}(e_1, e_2, e_3)$ 如图 22 所示。这个空间的维数为 3。

▲ 注意，为了方便可视化，图 22 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。

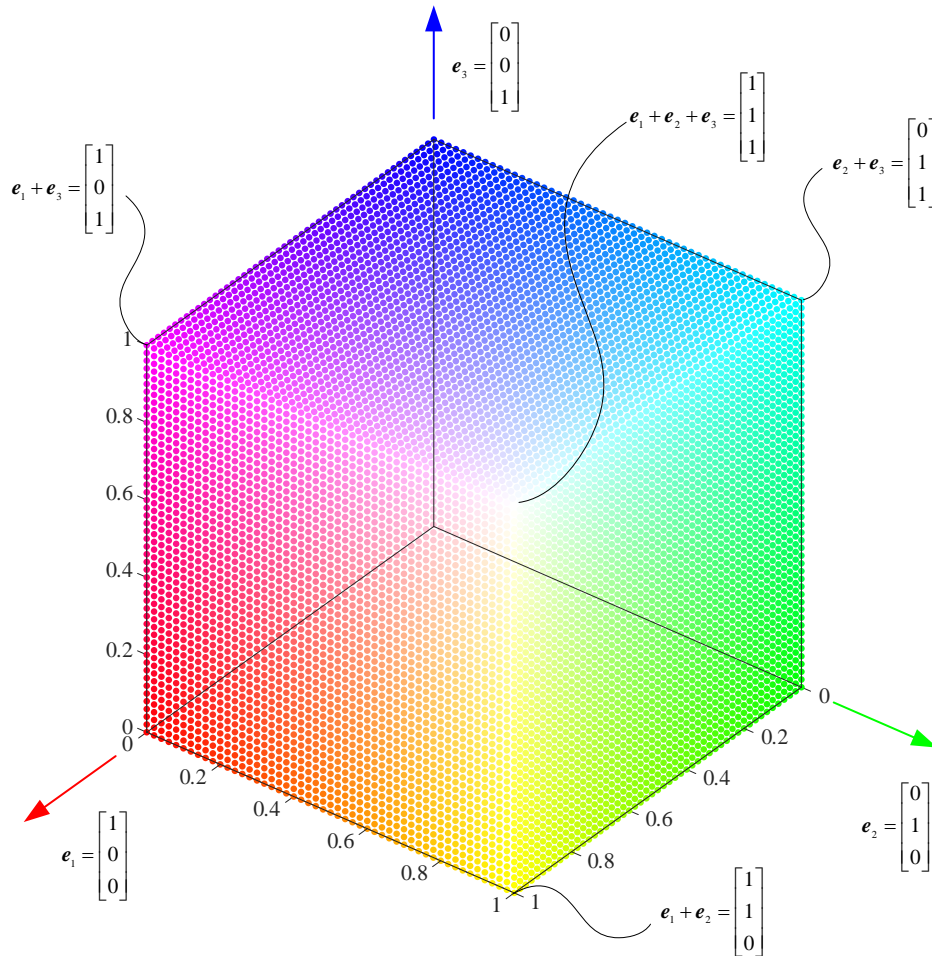


图 22. 三原色张成的彩色空间

三色均匀混合

一种特殊情况， e_1 、 e_2 和 e_3 这三个基底向量以均匀方式混合，得到的便是灰度：

$$\alpha(e_1 + e_2 + e_3) \quad (37)$$

如图 23 所示。其中，白色和黑色分别对应如下向量：

$$1 \times (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad 0 \times (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (38)$$



图 23. 灰度

7.4 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 24 所示， \mathbf{e}_1 (红色) 和 \mathbf{e}_2 (绿色) 张成平面 $H_1 = \text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ 内的向量 $\hat{\mathbf{a}}$ 与 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 线性相关；因为， $\hat{\mathbf{a}}$ 可以用 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 线性组合：

$$\hat{\mathbf{a}} = \alpha_1 \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \mathbf{e}_2 \quad (39)$$

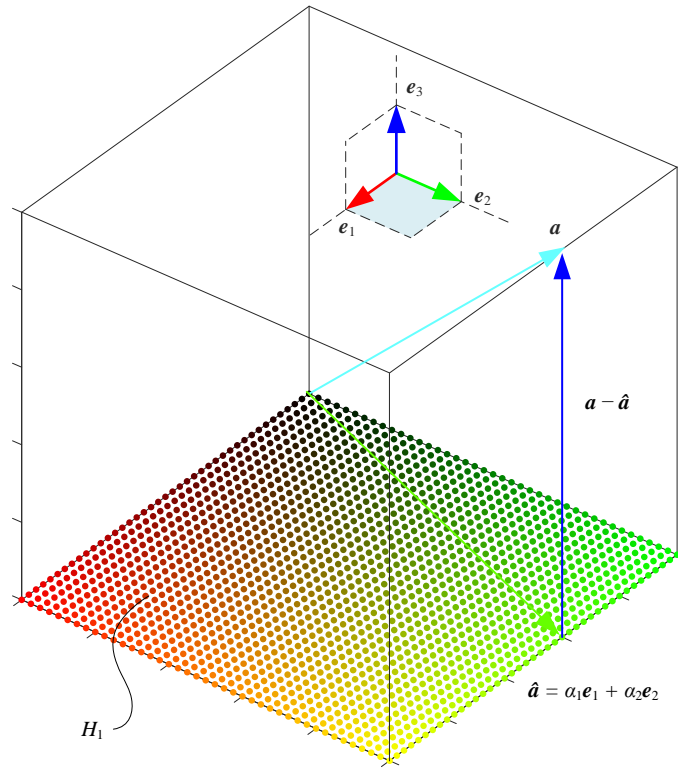
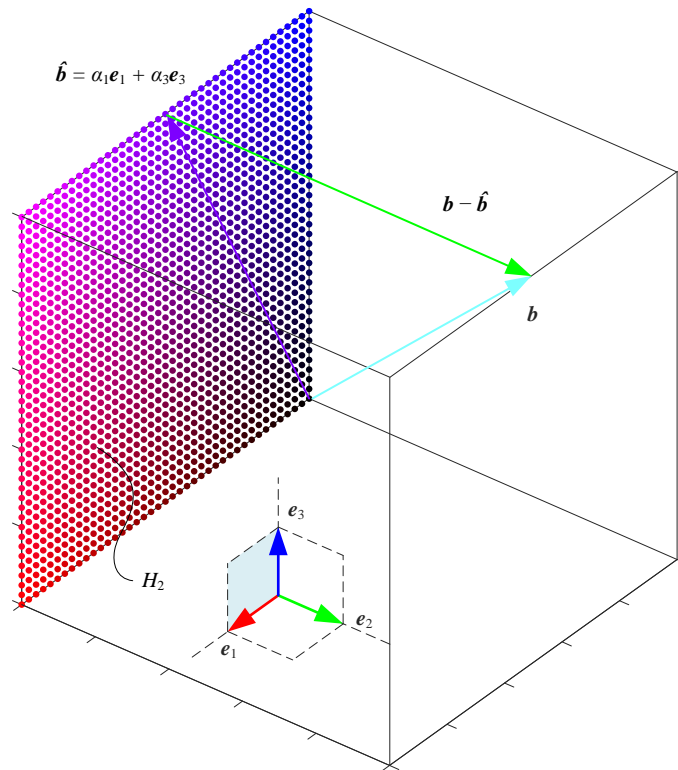
但是，图 24 中有一个跳出平面 H_1 的向量 \mathbf{a} 。 \mathbf{e}_3 和 H_1 互为正交补。

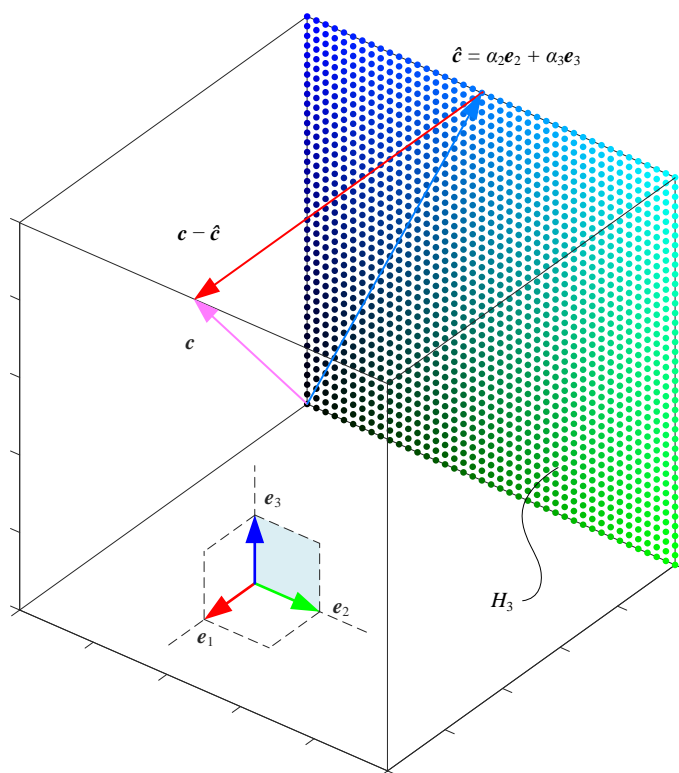
显然，向量 \mathbf{a} 与 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 线性无关，因为 \mathbf{a} 不能用 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_2 线性组合构造。从色彩角度来看，红光和绿光，调不出青色光。

向量 \mathbf{a} 和 $\hat{\mathbf{a}}$ 差在竖直方向的一束蓝光 $\mathbf{a} - \hat{\mathbf{a}}$ 。也就是，从光线合成角度来看， \mathbf{a} 比 $\hat{\mathbf{a}}$ 多了一抹蓝光。

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

图 25 所示为基底向量 \mathbf{e}_1 和 \mathbf{e}_3 张成平面 H_2 ，向量 \mathbf{b} 向 H_2 投影。图 26 所示为基底向量 \mathbf{e}_2 和 \mathbf{e}_3 张成平面 H_3 ，向量 \mathbf{c} 向 H_3 投影。

图 24. 基底向量 e_1 和 e_2 张成平面 H_1 , 向量 a 向 H_1 投影图 25. 基底向量 e_1 和 e_3 张成平面 H_2 , 向量 b 向 H_2 投影

图 26. 基底向量 e_2 和 e_3 张成平面 H_3 , 向量 c 向 H_3 投影

7.5 非正交基底：青色、品红、黄色

e_1 ($[1, 0, 0]^T$ red)、 e_2 ($[0, 1, 0]^T$ green) 和 e_3 ($[0, 0, 1]^T$ blue) 这三个基底向量任意两个组合构造三个向量 v_1 ($[0, 1, 1]^T$ cyan)、 v_2 ($[1, 0, 1]^T$ magenta) 和 v_3 ($[1, 1, 0]^T$ yellow):

$$v_1 = e_2 + e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_2 = e_1 + e_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_3 = e_1 + e_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (40)$$

v_1 、 v_2 和 v_3 也可以是构造三维彩色空间基底向量。 v_1 相当于 e_2 和 e_3 的线性组合， v_2 相当于 e_1 和 e_3 的线性组合， v_3 相当于 e_1 和 e_2 的线性组合。

印刷四分色模式 (CMYK color model) 就是基于基底 $[v_1, v_2, v_3]$ 。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。

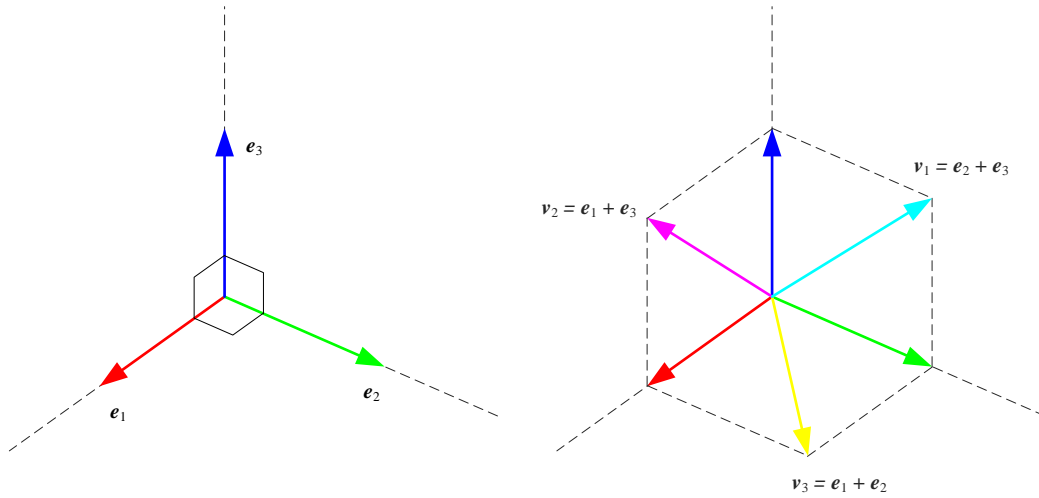


图 27. 正交基底到非正交基底

非正交基底

v_1 、 v_2 和 v_3 并非两两正交。经过计算可以发现 v_1 、 v_2 和 v_3 两两夹角均为 60° ：

$$\begin{aligned}\cos \theta_{v_1, v_2} &= \frac{v_1 \cdot v_2}{\|v_1\| \|v_2\|} = \frac{1}{\sqrt{2} \times \sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\ \cos \theta_{v_1, v_3} &= \frac{v_1 \cdot v_3}{\|v_1\| \|v_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2} \times \sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\ \cos \theta_{v_2, v_3} &= \frac{v_2 \cdot v_3}{\|v_2\| \|v_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2} \times \sqrt{2}} = \frac{1}{2}\end{aligned}\tag{41}$$

也就是说， $[v_1, v_2, v_3]$ 为非正交基底。

单色

图 28 所示为 v_1 、 v_2 和 v_3 各自张成的空间 $\text{span}(v_1)$ 、 $\text{span}(v_2)$ 、 $\text{span}(v_3)$ 。这三个空间的维数均为 1。

观察图 28 颜色变化，可以发现 $\text{span}(v_1)$ 、 $\text{span}(v_2)$ 、 $\text{span}(v_3)$ 分别代表着青色、品红和黄色颜色深浅变化。

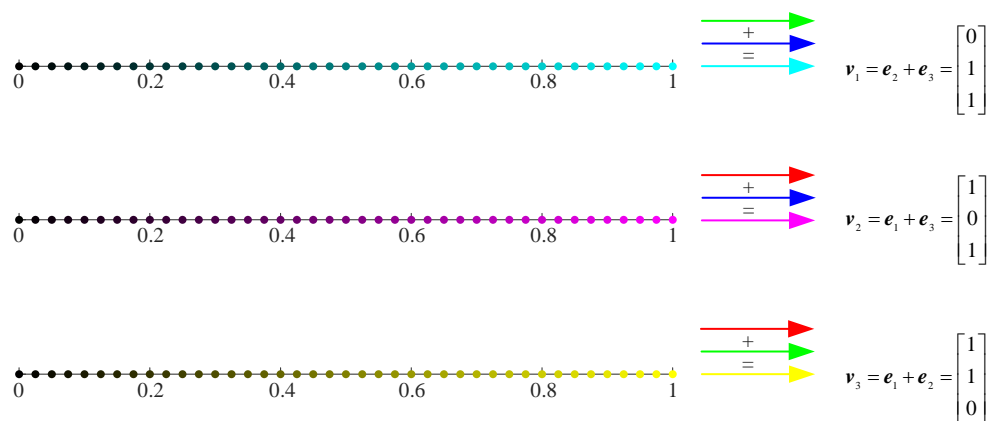
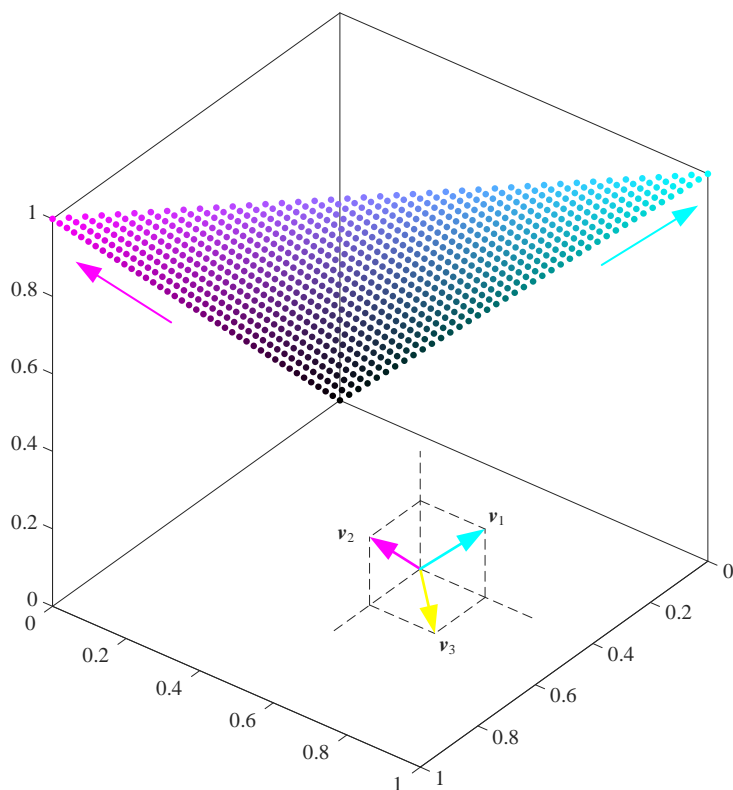
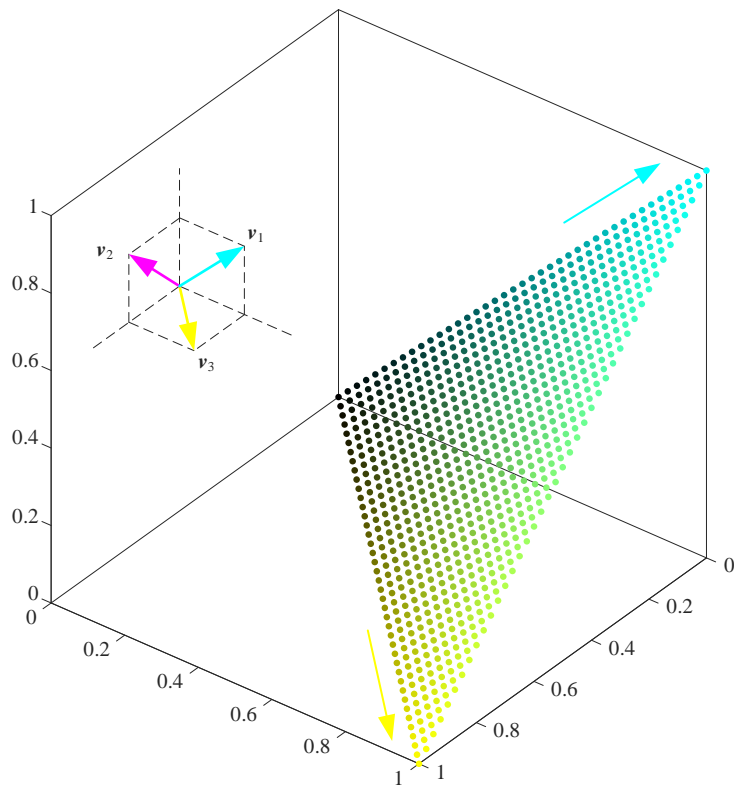
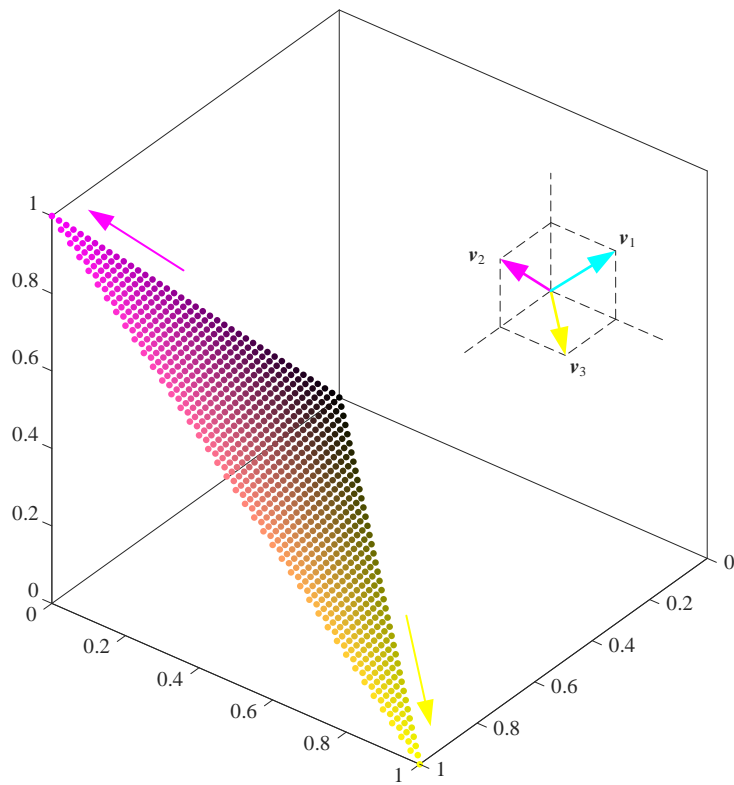


图 28. 单色子空间

双色合成

图 29 ~ 图 31 分别所示为 v_1 、 v_2 和 v_3 两两张成的三个空间 $\text{span}(v_1, v_2)$ 、 $\text{span}(v_1, v_3)$ 、 $\text{span}(v_2, v_3)$ 。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 29. 基底向量 v_1 和 v_2 张成的子空间

图 30. 基底向量 v_1 和 v_3 张成的子空间图 31. 基底向量 v_2 和 v_3 张成的子空间

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

7.6 基底转换：从红、绿、蓝，到青色、品红、黄色

RGB 色卡中， $[e_1, e_2, e_3]$ 是色彩空间的基底。CMYK 色卡中， $[v_1, v_2, v_3]$ 也是色彩空间的基底。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 A ，基底向量 $[e_1, e_2, e_3]$ 转化为基底向量 $[v_1, v_2, v_3]$ ：

$$[v_1 \ v_2 \ v_3] = A[e_1 \ e_2 \ e_3] \quad (42)$$

A 常被称作过渡矩阵，或转移矩阵 (transition matrix)。

将具体数值代入 (42)，得到：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (43)$$

即矩阵 A 为：

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (44)$$

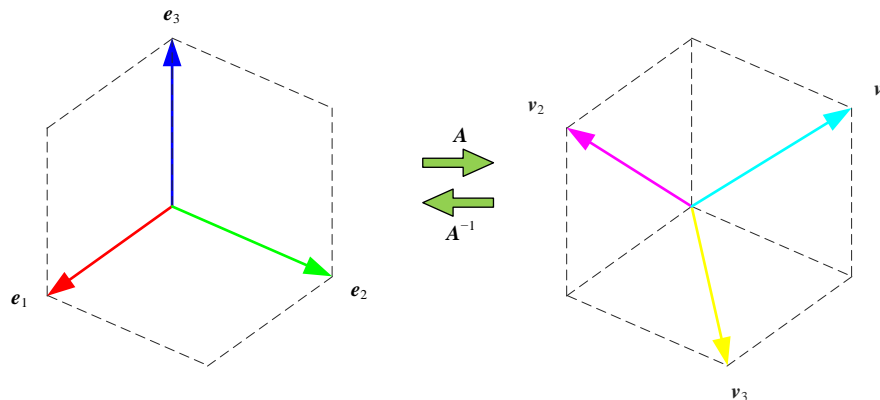
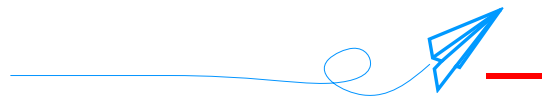
从基底 $[v_1, v_2, v_3]$ 向基底 $[e_1, e_2, e_3]$ 转换，可以通过 A^{-1} 完成：

$$A^{-1}[v_1 \ v_2 \ v_3] = [e_1 \ e_2 \ e_3] \quad (45)$$

通过计算可得到 A^{-1} ：

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} -0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & -0.5 \end{bmatrix} \quad (46)$$

图 32 所示为基底 $[e_1, e_2, e_3]$ 和基底 $[v_1, v_2, v_3]$ 之间相互转换关系。

图 32. 基底 $[e_1, e_2, e_3]$ 和基底 $[v_1, v_2, v_3]$ 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。为了帮助大家理解，我们用 RGB 三原色作为例子，给向量空间涂颜色！

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。在后续章节学习时，请大家注意规范正交基、正交矩阵、旋转这三个概念的联系。平面上，线性相关和线性无关就是看向量是否重合。此外，正交投影是本书非常重要的几何概念，我们会在本书后续内容反复用到。

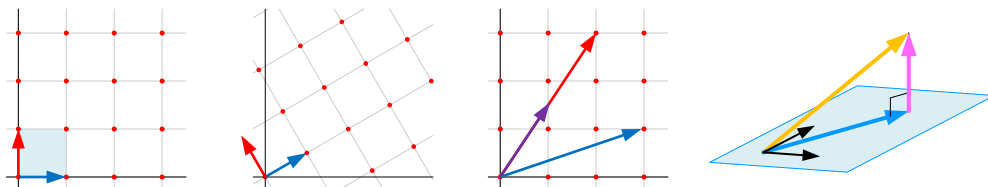


图 33. 总结本章重要内容的四副图