

19

From Lines to Hyperplanes

直线到超平面

用线性代数工具分析直线、平面和超平面



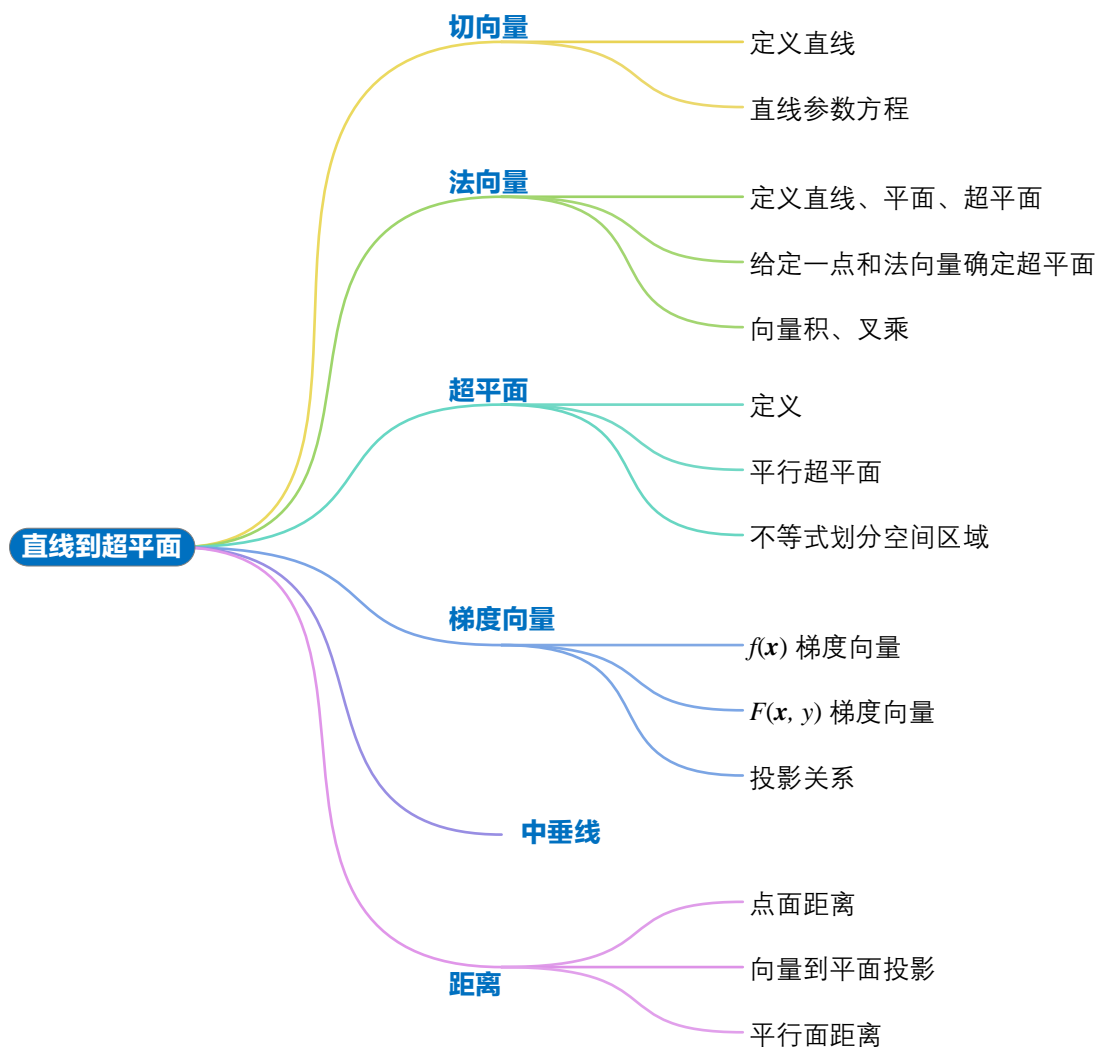
古人说，算数和几何是数学的双翼。而我认为，算数和几何是任何量化科学的基础和精髓。不仅如此，它们还是压顶石。任何科学的结果都需要用数字或者几何图形来表达。将结果转化为数字，需要借助算数；将结果转化为图形，需要借助几何。

An ancient writer said that arithmetic and geometry are the wings of mathematics; I believe one can say without speaking metaphorically that these two sciences are the foundation and essence of all the sciences which deal with quantity. Not only are they the foundation, they are also, as it were, the capstones; for, whenever a result has been arrived at, in order to use that result, it is necessary to translate it into numbers or into lines; to translate it into numbers requires the aid of arithmetic, to translate it into lines necessitates the use of geometry.

—— 约瑟夫·拉格朗日 (Joseph Lagrange) | 法国籍意大利裔数学家和天文学家 | 1736 ~ 1813



- ◀ matplotlib.pyplot.contour() 绘制等高线图
- ◀ matplotlib.pyplot.quiver() 绘制箭头图
- ◀ numpy.meshgrid() 产生网格化数据
- ◀ numpy.ones_like() 用来生成和输入矩阵形状相同的全 1 矩阵
- ◀ subs() 完成符号代数式中替换
- ◀ sympy.abc import x 定义符号变量 x
- ◀ sympy.diff() 求解符号函数导数和偏导解析式
- ◀ sympy.evalf() 将符号解析式中未知量替换为具体数值
- ◀ sympy.lambdify() 将符号表达式转化为函数
- ◀ sympy.plot_implicit() 绘制隐函数方程
- ◀ sympy.simplify() 简化代数式
- ◀ sympy.symbols() 定义符号变量



19.1 切向量：可以用来定义直线

至此，我们已经掌握大量线性代数运算工具。向量天然具备几何属性，这使得线性代数和几何之间的联系显而易见。本书前文利用几何视角帮助我们可视化重要的线性代数工具，让众多枯燥的概念和运算变得栩栩如生。

本系列丛书《数学要素》一册介绍大量的平面解析几何、立体几何知识，而线性代数工具可以将这些知识从二维、三维，延伸到更高维度，比如将直线的概念延伸到超平面，再比如将椭圆扩展到椭球。包括本章在内的接下来三章则利用线性代数工具讲解数据科学、机器学习中常见的几何知识。

切向量

如图 1 (a) 所示，直线上任意一点**切向量** (tangent vector) 和直线重合。

图 1 (b) 中，曲线上任意一点处的切向量是曲线该点处切线方向上的向量。

如图 1 (c) 所示，三维空间平面上某点切线有无数条，它们都在同一个平面内。

同样，如图 1 (d) 所示，光滑曲面某点切线有无数条，这些切线都在曲面上该点切平面内。也可以说，这些切线构造该切平面。换个角度思考，有了切平面内任意两个向量，若两者不平行，就可以确定切平面。

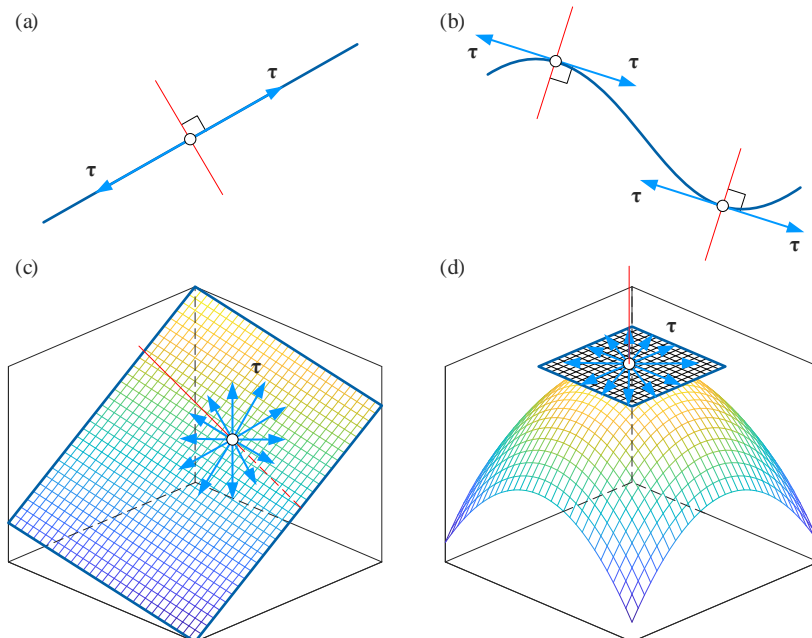


图 1. 直线、平面和光滑曲面切向量

本书一般用 τ 代表切向量。**单位切向量** (unit tangent vector) $\hat{\tau}$ 通过向量 τ 单位化获得：

$$\hat{\tau} = \frac{\tau}{\|\tau\|} \quad (1)$$

单位切向量 $\hat{\tau}$ 模为 1。

描述平面直线

切向量可以用来描述直线。给定空间一点 c 和直线的切向量 τ 便可以确定一条直线：

$$x = k\tau + c \quad (2)$$

其中， k 为任意实数，相当于缩放系数。

从几何角度思考，上式实际上是前文介绍的“缩放 (k) + 平移 (c)”。

从空间角度来看， $k\tau$ 通过原点， $k\tau$ 等价于向量空间 $\text{span}(\tau)$ 。而 $k\tau + c$ 则是仿射空间， $c \neq 0$ 时， $k\tau + c$ 不过原点。

举个例子，用切向量描述平面上直线：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (3)$$

$c = 0$ 时，如图 2 (a) 所示，这条穿越原点、切向量为 $\tau = [4, 3]^T$ 的直线可以写作：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} \quad (4)$$

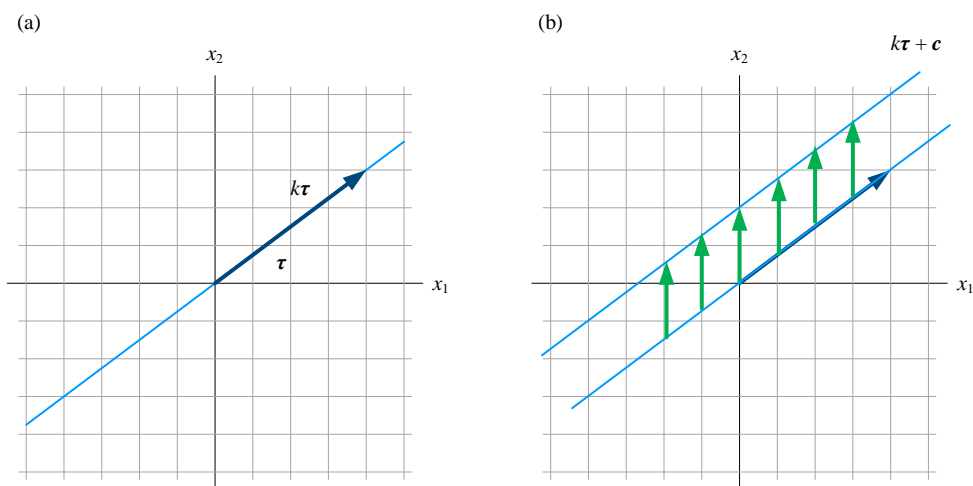


图 2. 用切向量定义平面直线

图 1 (b) 所示，(4) 直线向上平移 $c = [0, 2]^T$ ，得到如下直线：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

将 (5) 展开得到平面直线的参数方程：

$$\begin{cases} x_1 = 4k \\ x_2 = 3k + 2 \end{cases} \quad (6)$$

用 (3) 这种方式定义平面直线的好处是，切向量可以指向任意方向，比如水平方向 $[2, 0]^T$ 、竖直方向 $[0, -1]^T$ 。

描述三维空间直线

类似地，如图 3 所示，给定切向量和直线通过的一点 c ，便可以定义一条三维空间直线：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} \tau_1 \\ \tau_2 \\ \tau_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} \quad (7)$$

将 (7) 展开便得到三维空间直线的参数方程：

$$\begin{cases} x_1 = k\tau_1 + c_1 \\ x_2 = k\tau_2 + c_2 \\ x_3 = k\tau_3 + c_3 \end{cases} \quad (8)$$

上述直线定义方式可以很容易推广到高维。图 3 这幅图还告诉我们，从几何角度来看，一维向量空间就是一条过原点的直线；一维仿射空间就是一条未必过原点的直线。

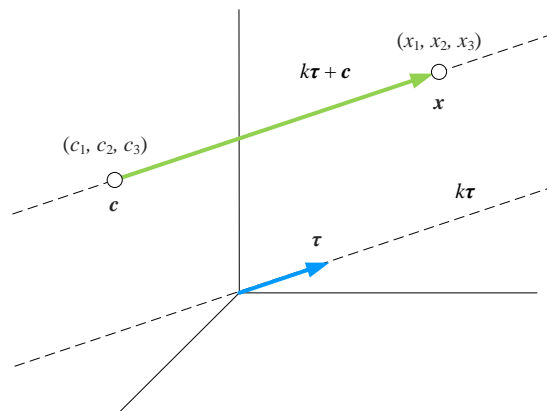


图 3. 空间直线定义

19.2 法向量：定义直线、平面、超平面

本系列丛书常用法向量定义直线、平面，甚至超平面 (hyperplane)。

直线**法向量** (normal vector) 为垂直于直线非零向量，如图 4 (a) 所示。

如图 4 (b) 所示，光滑曲线某点法向量垂直于曲线该点切线。

如图 4 (c) 所示，**平面法向量** (a normal line to a surface) 垂直于平面内任意直线。

光滑连续曲面某点法向量为曲面该点处**切平面** (tangent plane) 的法向量，如图 4 (d) 所示。

本章用 \boldsymbol{n} 或 \boldsymbol{w} 代表法向量。非零法向量 \boldsymbol{n} 的**单位法向量** (unit normal vector) $\hat{\boldsymbol{n}}$ 通过单位化获得：

$$\hat{\boldsymbol{n}} = \frac{\boldsymbol{n}}{\|\boldsymbol{n}\|} \quad (9)$$

同样，单位法向量 $\hat{\boldsymbol{n}}$ 模为 1。

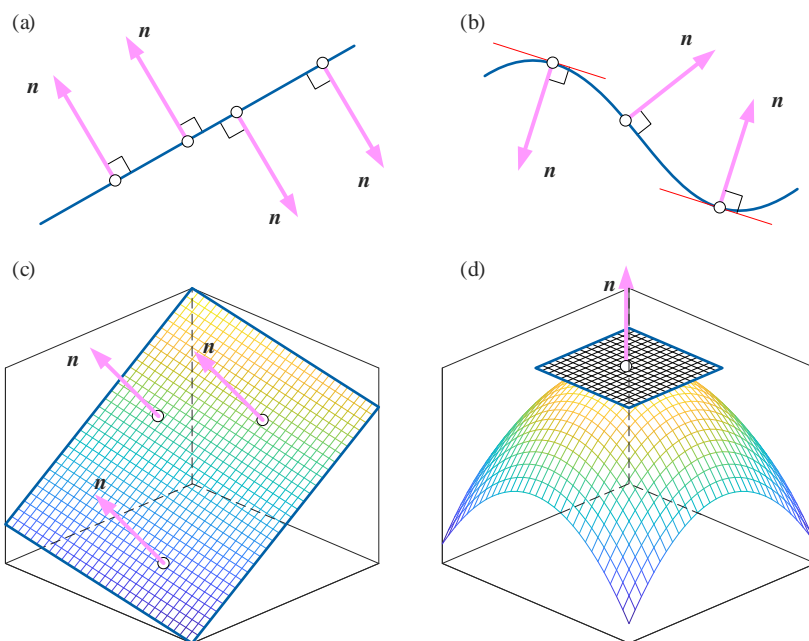


图 4. 直线、平面和光滑曲面法向量

描述三维空间平面

如图 5 所示，过空间一点与已知直线相垂直平面唯一。从向量视角来看，给定平面上一点和平面法向量 \boldsymbol{n} ，可以确定一个平面。

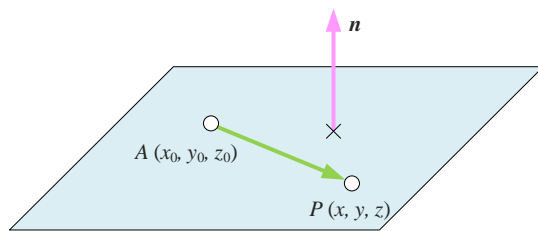


图 5. 空间平面定义

举两个例子

三维空间内某个平面通过点 $A(1, 2, 3)$ 且垂直于法向量 $\mathbf{n} = [3, 2, 1]^T$ 。

为了确定该直线解析式，定义平面上任意一点 $P(x_1, x_2, x_3)$ ，点 A 和 P 确定的向量垂直于法向量 \mathbf{n} ，所以下式成立：

$$\mathbf{n} \cdot \overrightarrow{AP} = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 - 1 \\ x_2 - 2 \\ x_3 - 3 \end{bmatrix} = 0 \quad (10)$$

整理 (10) 得到平面的解析式：

$$3x_1 + 2x_2 + x_3 - 10 = 0 \quad (11)$$

再举个例子，求通过三个点 $P_1(3, 1, 2)$ ， $P_2(1, 2, 3)$ ， $P_3(4, -1, 1)$ 的平面解析式。

\mathbf{a} 是起点为 P_1 终点为 P_2 的向量， \mathbf{b} 是起点为 P_1 终点为 P_3 的向量。用列向量来写， \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 分别为：

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

向量 \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 的向量积，即叉乘 $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ 结果如下：

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} \quad (13)$$

如图 6 所示， $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ 便是平面法向量 \mathbf{n} 。

有了法向量 \mathbf{n} ，仅仅需要平面任意一点便可以确定平面解析式。利用 P_1 和法向量 \mathbf{n} 可以得到如下平面解析式：

$$x_1 - x_2 + 3x_3 - 8 = 0 \quad (14)$$

$P_1(3, 1, 2)$ ， $P_2(1, 2, 3)$ ， $P_3(4, -1, 1)$ 三点都在 (14) 平面上，请大家自行验证。

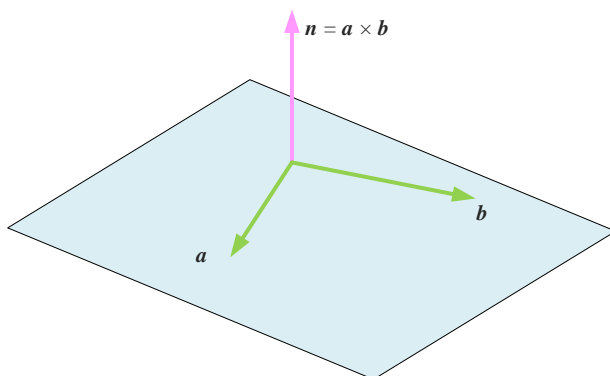


图 6. 向量叉乘为平面法向量

19.3 超平面：一维直线和二维平面的推广

本节将上一节平面扩展到多维空间中的超平面。

超平面

D 维超平面 (hyperplane) 的定义如下：

$$\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0 \quad (15)$$

其中，

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix} \quad (16)$$

\mathbf{w} 为超平面法向量，形式为列向量。 $D > 3$ 对应超平面，超平面是直线、平面推广到多维空间得到的数学概念。

▲ 注意，(15) 中，列向量 \mathbf{w} 和 \mathbf{x} 行数均为 D 。

(15) 也可以通过内积方式表达：

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x} + b = 0 \quad (17)$$

展开 (15) 得到：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_D x_D + b = 0 \quad (18)$$

$D = 2$

特别地， $D = 2$ 时，(17) 对应的平面直线解析式为：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + b = 0 \quad (19)$$

(19) 不止表达类似一次函数的直线。 $w_1 = 0$ 时，(19) 表达平行于横轴的直线，类似于常数函数直线，如图 7 (b)。 $w_2 = 0$ ，(19) 为垂直横轴直线，这显然不是函数图像，如图 7 (c)。二维直角坐标系中，法向量 \mathbf{w} 垂直于直线。

 $D = 3$

$D = 3$ 时，(17) 对应的三维空间平面为：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + b = 0 \quad (20)$$

图 7 所示为上述几种几何图形。空间中，如图 7 (d)，法向量 \mathbf{w} 垂直于平面或超平面。

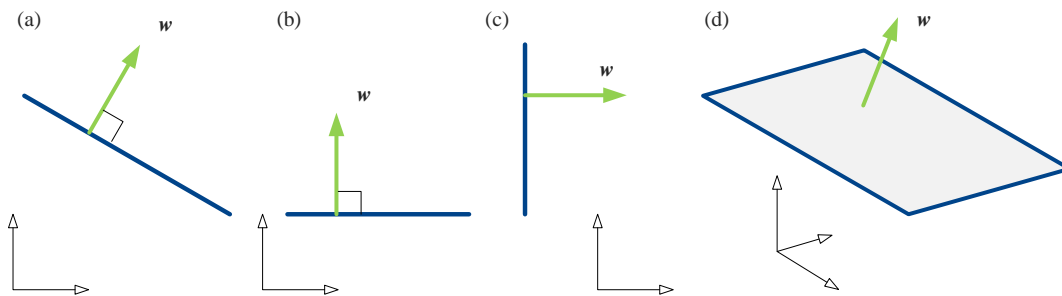


图 7. 几种特殊形态的直线、平面

超平面关系

如果两个超平面平行，则法向量平行。如果两个超平面垂直，则法向量垂直，即内积为 0。

(19) 中 b 取不同值时，代表一系列平行直线，如图 8 (a) 所示。

而 (20) 中 b 取不同值时则获得一系列平行平面，如图 8 (b) 所示。

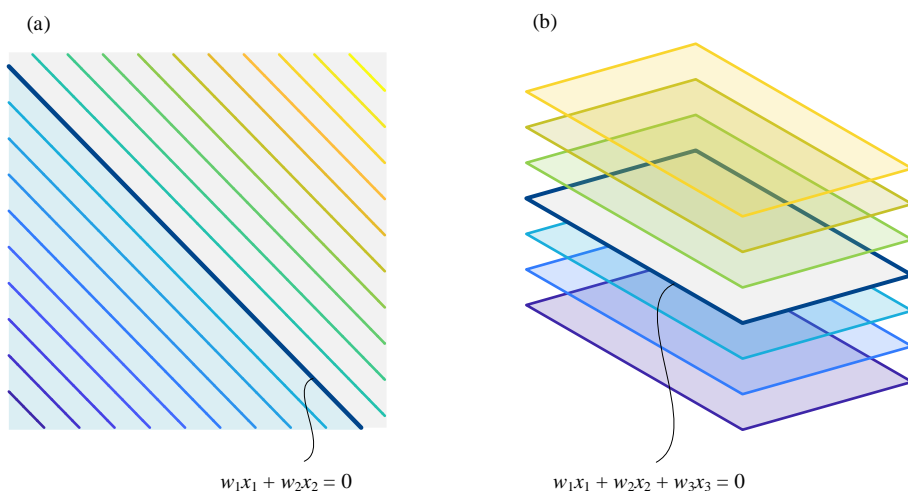


图 8. 平行直线和平行平面

划定区域

此外，某个确定的超平面解析式 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0$ 可以划分空间区域。这一点在机器学习很多算法中非常重要。我们在本系列丛书《数学要素》第 6 章讲解不等式时探讨过这一话题。

图 9 (a) 中， $w_1x_1 + w_2x_2 = 0$ 将平面划分为 $w_1x_1 + w_2x_2 > 0$ 和 $w_1x_1 + w_2x_2 < 0$ 两个区域。

图 9 (b) 中， $w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 = 0$ 将空间划分为 $w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 > 0$ 和 $w_1x_1 + w_2x_2 + w_3x_3 < 0$ 两个区域。

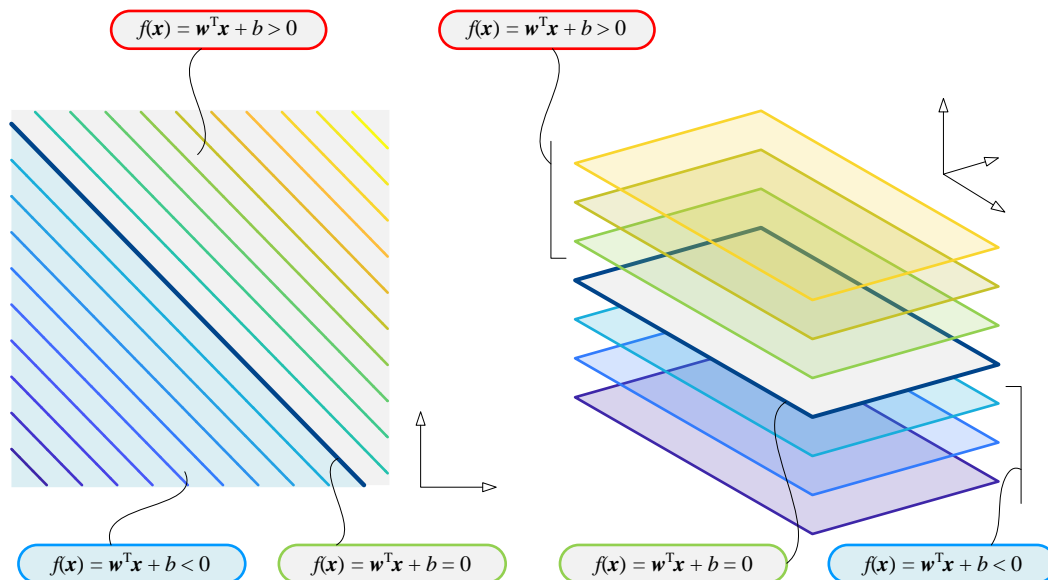


图 9. 超平面分割空间

定义多元一次函数：

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

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b \quad (21)$$

超平面“上方”的数据点满足：

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b > 0 \quad (22)$$

展开 (22) 得到：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_D x_D + b > 0 \quad (23)$$

超平面“下方”的数据点满足：

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b < 0 \quad (24)$$

展开 (24) 得到：

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_D x_D + b < 0 \quad (25)$$

▲ 注意，这里所说的“上方”和“下方”仅仅是方便大家理解。更准确地说，以 (15) 中 $f(\mathbf{x}) = 0$ 为基准，“上方”对应 $f(\mathbf{x}) > 0$ ，“下方”对应 $f(\mathbf{x}) < 0$ 。

在机器学习中，类似图 9 中起到划分空间作用的超平面，常常被称作**决策平面** (decision surface)、**决策边界** (decision boundary)。实际应用时，决策平面、决策边界可以是线性，也可以是非线性。

19.4 平面与梯度向量

本节将超平面和函数联系在一起，并用梯度向量来进一步分析超平面。

构造多元一次函数：

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b \quad (26)$$

$f(\mathbf{x}) = 0$ 对应的便是 (15) 所示超平面解析式。 $f(\mathbf{x}) = c$ 时，相当于 (15) 所示超平面平行移动。

$f(\mathbf{x})$ 函数的梯度向量为：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_D} \end{bmatrix} = \mathbf{w} \quad (27)$$

相信大家已经发现 $f(\mathbf{x})$ 函数的梯度向量 \mathbf{w} 便是 (15) 给出超平面的法向量。

构造新函数

令 $y = f(\mathbf{x})$ ，构造 $D + 1$ 元函数 $F(\mathbf{x}, y)$ ：

$$F(\mathbf{x}, y) = \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b - y \quad (28)$$

$F(\mathbf{x}, y) = 0$ 相当于降维，得到 (26)。

$F(\mathbf{x}, y)$ 函数的梯度向量为：

$$\nabla F(\mathbf{x}, y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} \\ \frac{\partial F}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial F}{\partial x_D} \\ \frac{\partial F}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_D \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ -1 \end{bmatrix}_{(D+1) \times 1} \quad (29)$$

容易发现，(29) 和 (27) 梯度向量之间存在如下投影关系：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = [\mathbf{I}_{D \times D} \quad \mathbf{0}_{D \times 1}]_{D \times (D+1)} \nabla F(\mathbf{x}, y) \quad (30)$$

展开上式得到：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = [\mathbf{I} \quad \mathbf{0}] \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ -1 \end{bmatrix} = \mathbf{w}_{D \times 1} \quad (31)$$

上式相当于从 $D + 1$ 维空间降维到 D 维空间。图 10 所示为三维空间平面法向量 $\mathbf{n} = \nabla F(\mathbf{x}, y)$ 和梯度向量 $\nabla f(\mathbf{x})$ 之间关系。

上述投影关系对于理解很多机器学习算法至关重要，下面我用几个三维平面展开讲解上述关系。

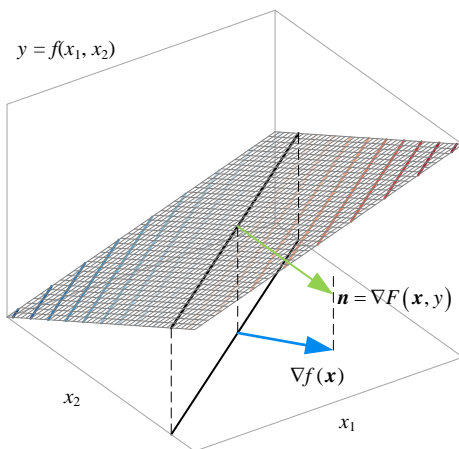


图 10. 平面法向量和梯度向量的关系

第一个例子

图 11 (a) 展示的平面垂直于 x_1y 平面，具体解析式如下：

$$f(x_1, x_2) = x_1 \quad (32)$$

二元函数 $f(x_1, x_2)$ 梯度向量如下：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (33)$$

如图 11 (b) 所示，发现梯度向量平行于 x_1 轴，方向为 x_1 正方向，向量方向和大小不随位置变化。沿着梯度方向运动， $f(x_1, x_2)$ 不断增大。 $f(x_1, x_2)$ 等高线相互平行，梯度向量和函数等高线垂直。

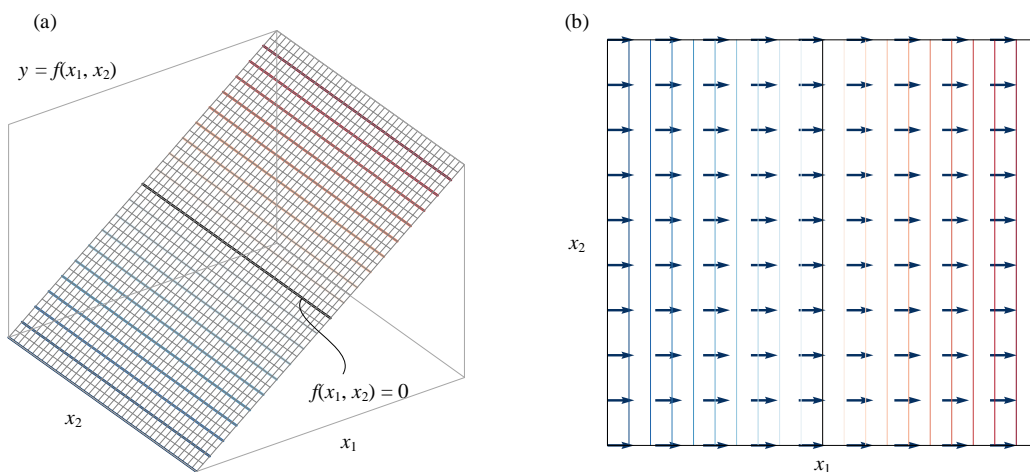


图 11. 垂直于 x_1y 平面，梯度向量朝向 x_1 正方向

构造三元函数 $F(x_1, x_2, y)$ ：

$$F(x_1, x_2, y) = x_1 - y \quad (34)$$

$F(x_1, x_2, y)$ 梯度向量：

$$\nabla F(\mathbf{x}, y) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F}{\partial x_1} \\ \frac{\partial F}{\partial x_2} \\ \frac{\partial F}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (35)$$

$\nabla F(\mathbf{x}, y)$ 是图 11 (a) 三维平面的法向量。 $\nabla F(\mathbf{x}, y)$ 向 x_1x_2 平面投影得到 $\nabla f(\mathbf{x})$ ，即：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \nabla F(\mathbf{x}, y) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (36)$$

图 11 (b) 等高线则对应一系列垂直于横轴的直线，它们可以写成：

$$x_1 + b = 0 \quad (37)$$

第二个例子

再举个例子，图 12 (a) 对应的二元函数 $f(x_1, x_2)$ 解析式为：

$$f(x_1, x_2) = -x_1 \quad (38)$$

$f(x_1, x_2)$ 梯度向量如下：

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (39)$$

图 12 (b) 告诉我们， $f(x_1, x_2)$ 梯度向量同样平行于 x_1 轴，方向为 x_1 负方向，向量方向和大小也不随位置变化。

类似 (34)，请大家自行构造三元函数 $F(x_1, x_2, y)$ ，并计算它的梯度向量 $\nabla F(\mathbf{x}, y)$ 。并且分析 $\nabla F(\mathbf{x}, y)$ 和 (39) 的关系。

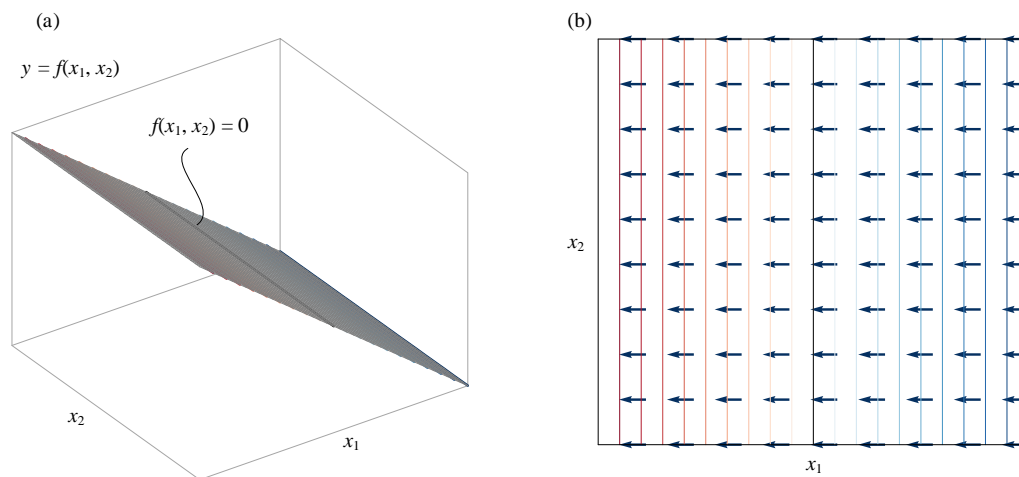


图 12. 垂直于 x_1y 平面，梯度向量朝向 x_1 负方向

第三个例子

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

图 13 展示平面解析式 $f(x_1, x_2)$ 如下:

$$f(x_1, x_2) = x_2 \quad (40)$$

$f(x_1, x_2)$ 梯度向量如下:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (41)$$

如图 13 (b) 所示, $f(x_1, x_2)$ 梯度向量平行于 x_2 轴, 方向朝向 x_2 正方向。

也请大家构造其三元函数 $F(x_1, x_2, y)$, 同时计算它的梯度向量 $\nabla F(\mathbf{x}, y)$ 。

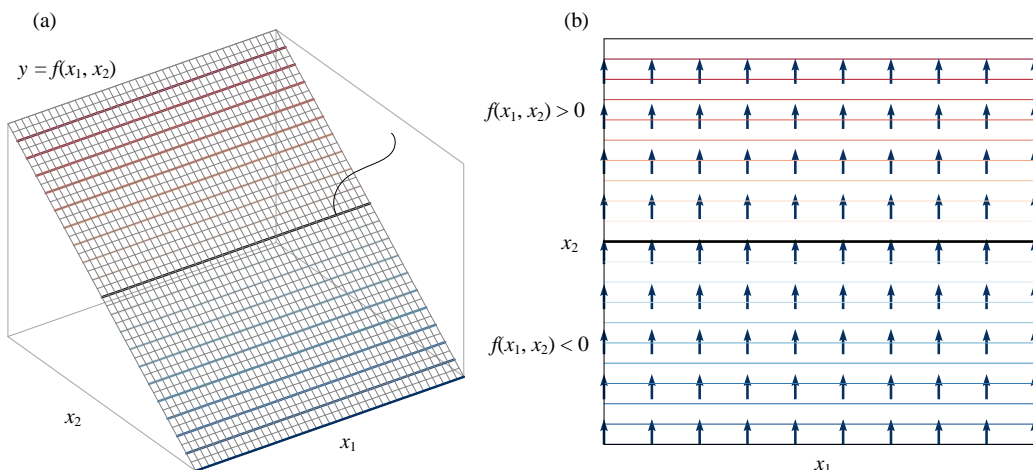


图 13. 垂直于 x_2y 平面, 梯度向量为 x_2 正方向

第四个例子

最后一个例子, 图 14 (a) 平面解析式如下:

$$f(x_1, x_2) = x_1 + x_2 \quad (42)$$

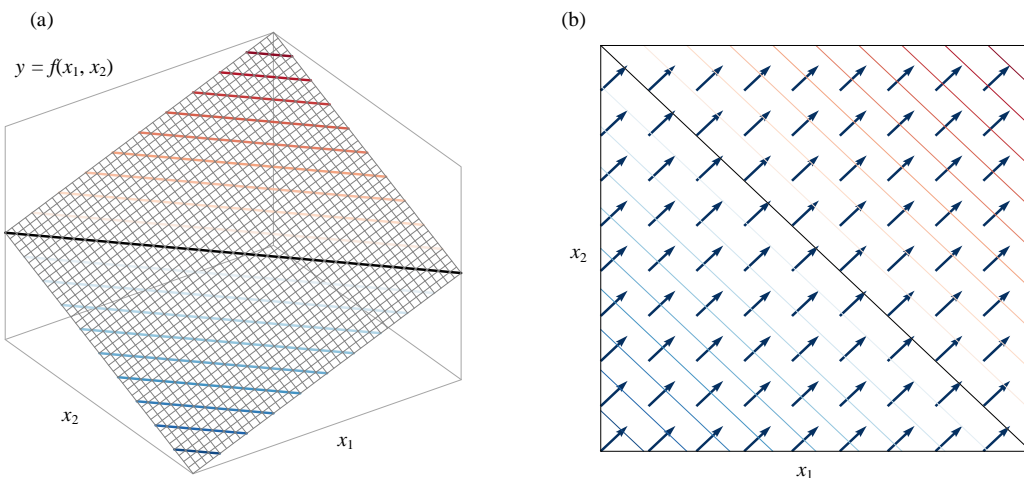
$f(x_1, x_2)$ 梯度也是一个固定向量, 具体如下:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (43)$$

如图 14 所示, 梯度向量和 x_1 轴正方向夹角为 45° , 指向右上方。沿着此梯度方向运动, $f(x_1, x_2)$ 不断增大。请大家按照上述思路分析图 14 平面。



本节回答了本系列丛书《数学要素》第 13 章有关梯度向量的问题。

图 14. $f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$ 平面和梯度

请读者自行修改 Bk4_Ch19_01.py，并绘制图 11 ~ 图 14 几幅图像。

19.5 中垂线：用向量求解析式

两点构成一条线段，**中垂线** (perpendicular bisector) 通过线段中点，且垂直该线段。本节介绍如何利用向量求解中垂线解析式。

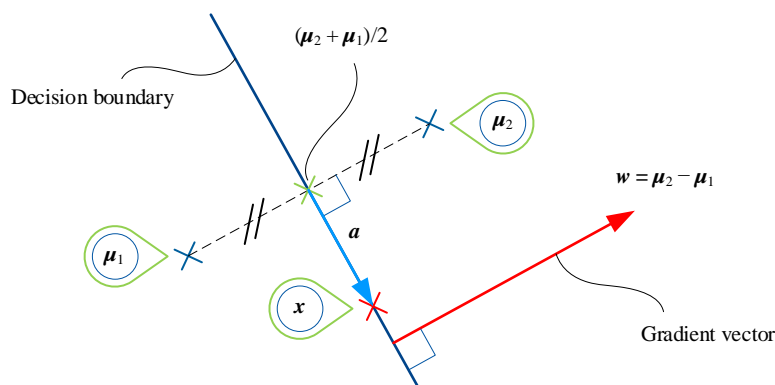


本系列丛书《数学要素》第 7 章介绍过中垂线，请大家回顾。

如图 15 所示， \mathbf{x} 代表中垂线上任意一点，中垂线通过 μ_1 和 μ_2 中点 $(\mu_2 + \mu_1)/2$ 。

\mathbf{a} 为 \mathbf{x} 和中点 $(\mu_2 + \mu_1)/2$ 构成的向量：

$$\mathbf{a} = \mathbf{x} - \frac{1}{2}(\mu_2 + \mu_1) \quad (44)$$

图 15. $\mu_1 \neq \mu_2$ 时，中垂线位置

$(\mu_2 - \mu_1)$ 为中垂线法向量，它垂直 a ，所以下式成立：

$$(\mu_2 - \mu_1) \cdot a = (\mu_2 - \mu_1)^T a = 0 \quad (45)$$

将 (44) 代入 (45)，得到：

$$(\mu_2 - \mu_1)^T \left[x - \frac{1}{2}(\mu_2 + \mu_1) \right] = 0 \quad (46)$$

展开得到中垂线解析式：

$$\underbrace{(\mu_2 - \mu_1)^T}_{\text{Norm vector}} x - \underbrace{\frac{1}{2}(\mu_2 - \mu_1)^T (\mu_2 + \mu_1)}_{\text{Constant}} = 0 \quad (47)$$

注意，(47) 中 $(\mu_2 - \mu_1)^T$ 不能消去。这就是本书第 5 章介绍的矩阵乘法不满足消去率，即 $AB = AC$ 或 $BA = CA$ ，即便 A 不是零矩阵 O ，也不能得到 $B = C$ 。 $AB = AC$ 能得到 $A(B - C) = O$ ；而 $BA = CA$ 能得到 $(B - C)A = O$ 。对于 $AB = AC$ ，能否进一步消去 A ，要看 A 是否可逆。

举个例子

平面上一条直线为 (1, 2) 和 (3, 4) 两点的中垂线，容易知道这条直线的法向量为：

$$w = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (48)$$

中垂线通过 (1, 2) 和 (3, 4) 两点的中点 (2, 3)。这样有了法向量和直线上一点，就可以构造如下等式：

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} x_1 - 2 \\ x_2 - 3 \end{bmatrix} = 0 \quad (49)$$

整理得到中垂线的解析式：

$$x_1 + x_2 - 5 = 0 \quad (50)$$



白话说，机器学习中的聚类分析 (cluster analysis) 就是“物以类聚，人以群分”，根据样本的特征，将其分成若干类。 K 均值聚类 (K -means clustering) 是最基本的聚类算法之一。

K 均值聚类的每一簇样本数据用簇质心 (cluster centroid) 来描述。二聚类问题就是把样本数据分成两类。假设两类样本的簇质心分别为 μ_1 和 μ_2 。以欧氏距离为距离度量，距离质心 μ_1 更近的点，被划分为 C_1 簇；而距离质心 μ_2 更近的点，被划分为 C_2 簇。

将鸢尾花数据的标签去掉，用其第一二特征，即花萼长度、花萼宽度，作为依据，用 K 均值聚类把样本数据分为三类。图 16 中红色 \times 代表簇质心，红色线就是决策边界。大家可能已经发现，每一段决策边界都是两个簇质心连线的中垂线。

本系列《机器学习》一册将展开讲解 K 均值聚类。

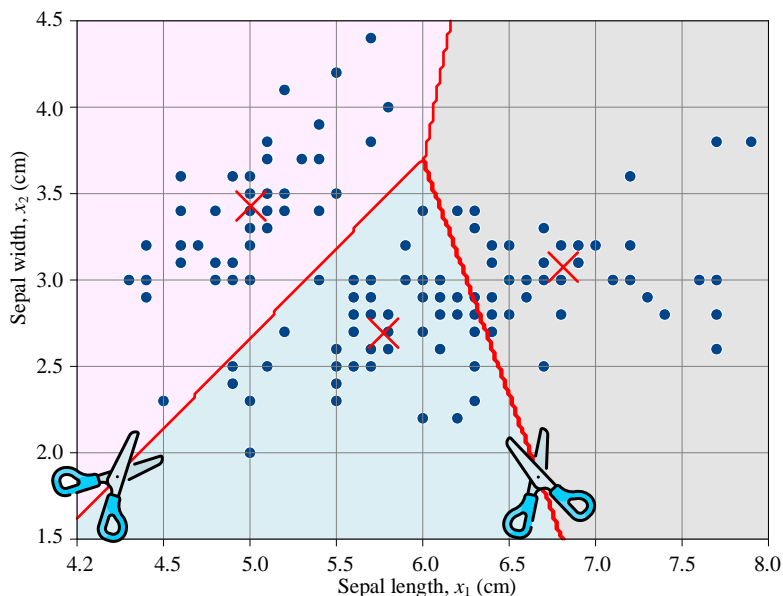


图 16. K 均值算法聚类鸢尾花数据

19.6 用向量计算距离

本节要介绍两个重要距离——点面距离，平行面距离。这两个距离实际上是本书第 9 章点线距离的推广。不同的是，第 9 章的直线、平面都过原点，本节的直线、平面、超平面未必过原点。本节内容对于理解很多机器学习算法特别重要，请大家务必认真对待。建议大家跟着本节思路一起推导公式。

点面距离

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

图 17 所示，直线、平面或超平面上任一点为 x ，满足下式：

$$w^T x + b = 0 \quad (51)$$

下面讲解如何用线性代数工具计算图 17 中超平面外一点 q 到 (51) 距离。

整理 (51) 得到：

$$w^T x = -b \quad (52)$$

直线、平面或超平面上取任意一点 x ， q 和 x 构造的向量为 a ：

$$a = q - x \quad (53)$$

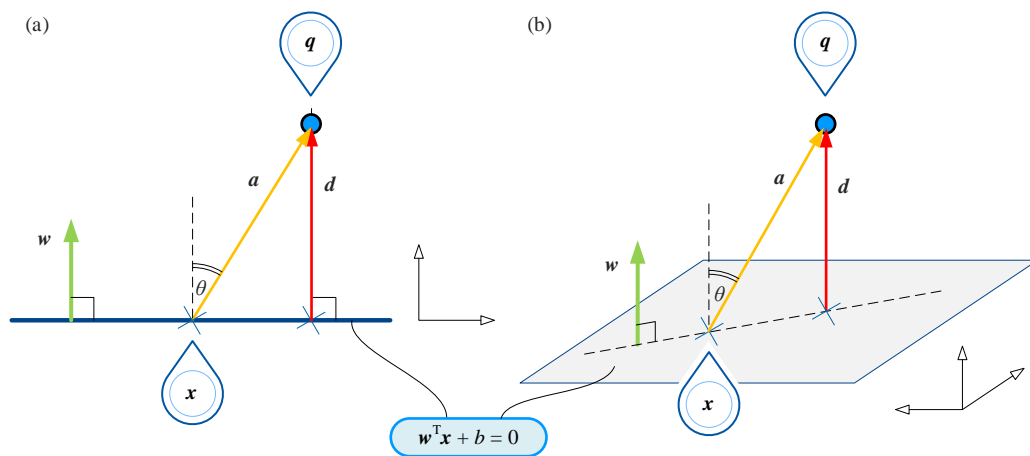


图 17. 直线外一点到直线距离，和平面外一点到平面距离

向量 a 向梯度向量 w 方向向量投影，可以得到向量 d ：

$$d = \|a\| \cos \theta \frac{w}{\|w\|} = \|a\| \frac{w^T a}{\|a\| \|w\|} \frac{w}{\|w\|} = \frac{w^T a}{\|w\|^2} w \quad (54)$$

向量 d 模便是超平面外一点 q 到超平面的距离 d ：

$$d = \|d\| = \frac{\|w^T a w\|}{\|w\|^2} = \frac{\overset{\text{abs()}}{|w^T a|} \overset{\text{norm()}}{\|w\|}}{\|w\|^2} = \frac{|w^T a|}{\|w\|} = \frac{|w \cdot a|}{\|w\|} \quad (55)$$

考虑到 $w^T a$ 结果为标量，因此 (55) 分子仅用绝对值。

将 (53) 代入 (55)，整理得到：

$$d = \frac{|w^T (q - x)|}{\|w\|} = \frac{|w^T q - w^T x|}{\|w\|} = \frac{|w \cdot q - w \cdot x|}{\|w\|} \quad (56)$$

将 (52) 代入 (56) 得到：

$$d = \frac{|\mathbf{w}^T(\mathbf{q} - \mathbf{x})|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{|\mathbf{w}^T\mathbf{q} + b|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{|\mathbf{w} \cdot \mathbf{q} + b|}{\|\mathbf{w}\|} \quad (57)$$

本系列丛书《数学要素》第 7 章介绍过，距离可以有“正负”。将 (57) 分子绝对值符号去掉得到含有正负的距离为：

$$d = \frac{\mathbf{w}^T\mathbf{q} + b}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{\mathbf{w} \cdot \mathbf{q} + b}{\|\mathbf{w}\|} \quad (58)$$

配合前文介绍的内容， $d > 0$ ， \mathbf{q} 在超平面 $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 0$ “上方”； $d < 0$ ， \mathbf{q} 在超平面 $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 0$ “下方”； $d = 0$ ， \mathbf{q} 在超平面 $\mathbf{w}^T\mathbf{x} + b = 0$ 内。

正交投影点坐标

下面求解点 \mathbf{q} 在超平面上的正交投影点 \mathbf{x}_q 的坐标。

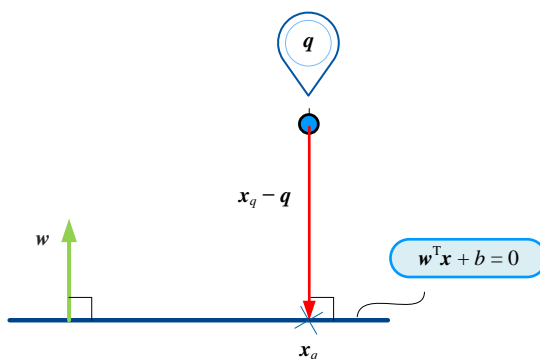


图 18. 直线外一点到直线的正交投影点

如图 18 所示， \mathbf{x}_q 在超平面上，因此下式成立：

$$\mathbf{w}^T\mathbf{x}_q + b = 0 \quad (59)$$

此外， \mathbf{w} 平行于 $\mathbf{x}_q - \mathbf{q}$ 由此可以构造第二个等式：

$$\mathbf{x}_q - \mathbf{q} = k\mathbf{w} \quad (60)$$

k 为任意非零实数。整理上式， \mathbf{x}_q 为：

$$\mathbf{x}_q = k\mathbf{w} + \mathbf{q} \quad (61)$$

将 (61) 代入 (59)，得到：

$$\mathbf{w}^T(k\mathbf{w} + \mathbf{q}) + b = 0 \quad (62)$$

整理上式得到 k

$$k = -\frac{(\mathbf{w}^T \mathbf{q} + b)}{\mathbf{w}^T \mathbf{w}} \quad (63)$$

将上式代入 (61)，得到正交投影点为 \mathbf{x}_q ：

$$\mathbf{x}_q = \mathbf{q} - \frac{(\mathbf{w}^T \mathbf{q} + b)}{\mathbf{w}^T \mathbf{w}} \mathbf{w} \quad (64)$$

注意，上式分母为 $\mathbf{w}^T \mathbf{w}$ 标量，不能消去其中的 \mathbf{w} 。

向量在过原点平面内投影

同样利用上述投影思路，可以计算如图 19 所示的向量 \mathbf{q} 在平面 $H (\mathbf{w}^T \mathbf{x} = 0)$ 的投影：

$$\text{proj}_H(\mathbf{q}) = \mathbf{q} - \text{proj}_w(\mathbf{q}) = \mathbf{q} - \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{q}}{\mathbf{w}^T \mathbf{w}} \mathbf{w} \quad (65)$$

比较 (64) 和 (65)，可以发现 (65) 就是 (64) 中 $b = 0$ 的特殊情况。 $\text{proj}_H(\mathbf{q})$ 和 $\text{proj}_w(\mathbf{q})$ 正交。这也不难理解，平面 $\mathbf{w}^T \mathbf{x} = 0$ 通过原点 $\mathbf{0}$ ，即 $b = 0$ 。从向量空间角度， $\text{span}(\mathbf{w})$ 是一维空间， $\text{span}(\mathbf{w})$ 和 H 互为正交补。

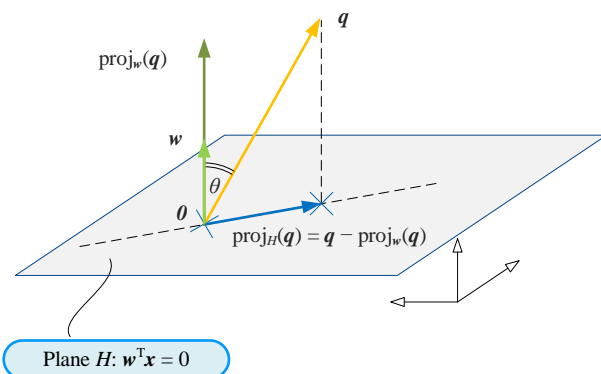


图 19. 向量 \mathbf{q} 在平面 H 的投影

平行面距离

给定两个相互平行超平面的解析式分别如下：

$$\begin{cases} \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b_1 = 0 \\ \mathbf{w}^T \mathbf{x} + b_2 = 0 \end{cases} \quad (66)$$

如图 20 所示， A 和 B 分别位于这两个超平面上， A 点坐标为 \mathbf{x}_A ， B 点坐标为 \mathbf{x}_B 。构造如下等式：

$$\begin{cases} \mathbf{w}^T \mathbf{x}_A + b_1 = 0 \\ \mathbf{w}^T \mathbf{x}_B + b_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{w}^T \mathbf{x}_A = -b_1 \\ \mathbf{w}^T \mathbf{x}_B = -b_2 \end{cases} \quad (67)$$

构造向量 \mathbf{a} 起点为 B ，终点为 A ：

$$\mathbf{a} = \mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B \quad (68)$$

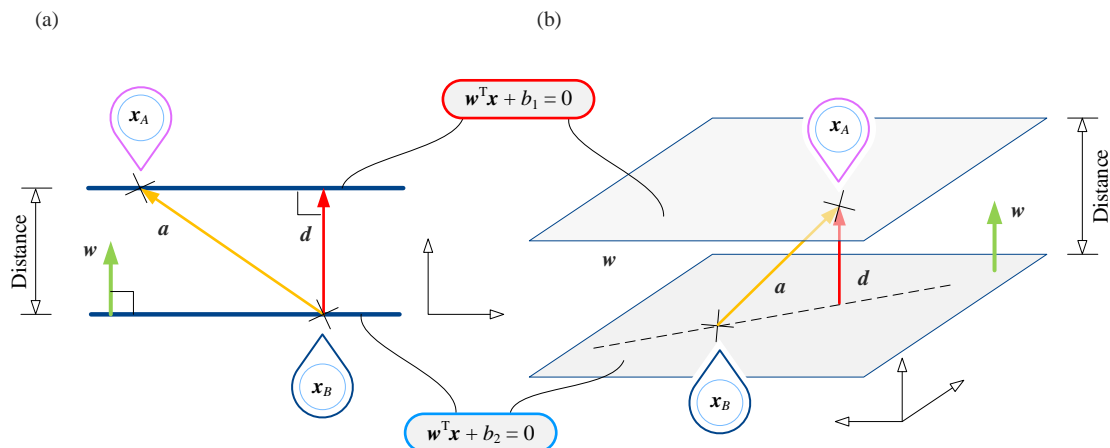


图 20. 利用向量投影计算间隔宽度

根据 (55)，向量 \mathbf{a} 在向量 \mathbf{w} 上的投影就是我们要求的两个平行面之间距离：

$$\frac{|\mathbf{w}^T \mathbf{a}|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{|\mathbf{w} \cdot \mathbf{a}|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{|\mathbf{w}^T (\mathbf{x}_A - \mathbf{x}_B)|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{|-b_1 - (-b_2)|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{|b_2 - b_1|}{\|\mathbf{w}\|} \quad (69)$$

如果去掉 (69) 分子中的绝对值，我们可以根据距离的正负，判断两个平面的“上下”关系。

相比本书之前内容，本章内容很特殊。本章之前在讲解线性代数工具时，我们利用几何视角观察数学工具背后的思想。而本章正好相反，本章讲解的是几何知识，采用的是线性代数工具。

有向量的地方，就有几何！

本章内容告诉我们，这句话反过来也正确。有几何的地方，就有向量！

本书讲解的几何知识对于很多机器学习、数据科学算法非常重要。本系列丛书在讲到具体算法时，会提醒大家其中用到了本章和下两章介绍的对应的几何知识。

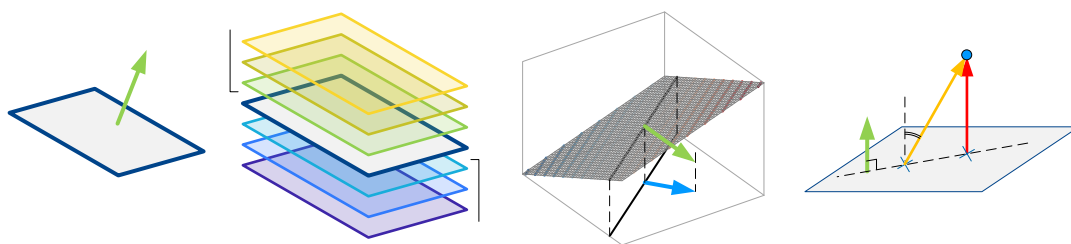


图 21. 总结本章重要内容的四幅图