



Vector Space

# 向量空间

用三原色给向量空间涂颜色



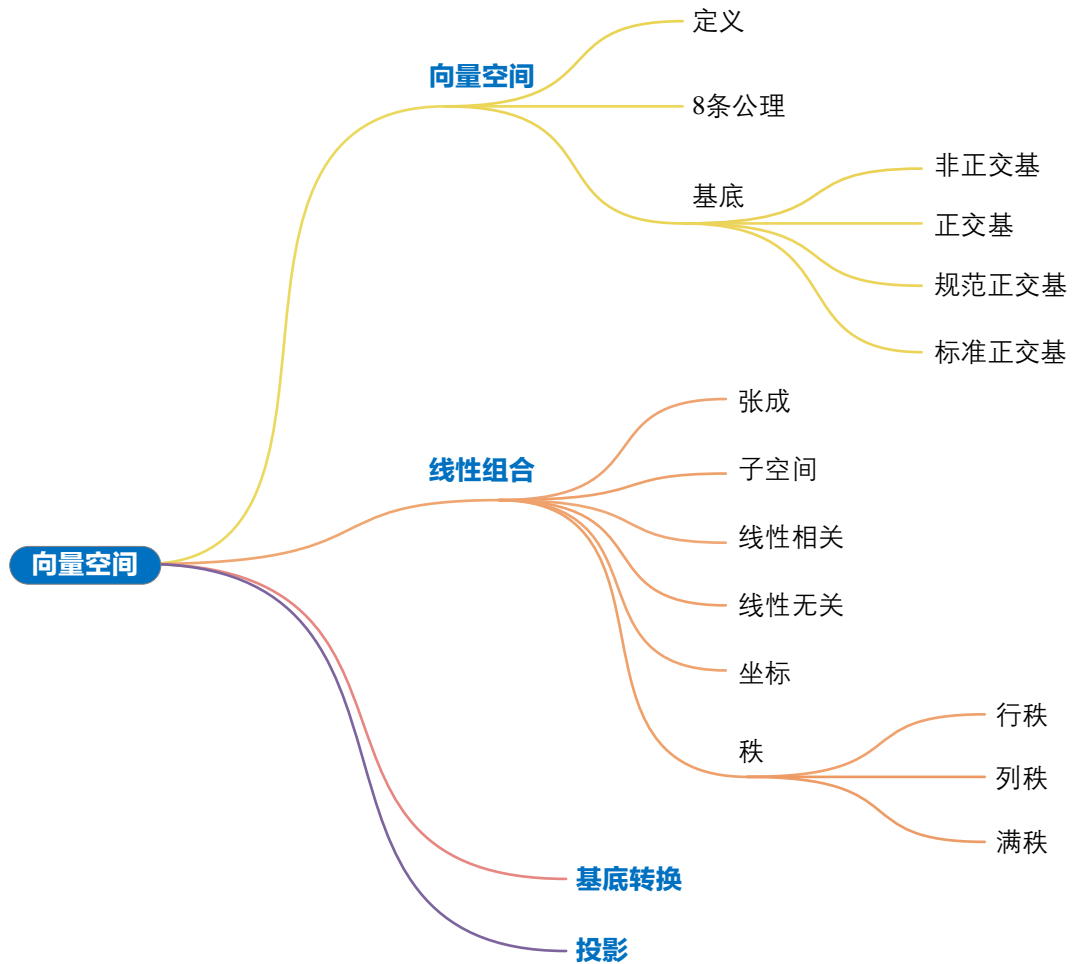
数学，是神灵创造宇宙的语言。

*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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

## 7.1 向量空间：从直角坐标系说起

### 从笛卡尔坐标系说起

**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  $\mathbb{R}^n$  ( $n = 2, 3$ )。

⚠ 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。

在这两个向量空间中，我们可以完成向量加减、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。

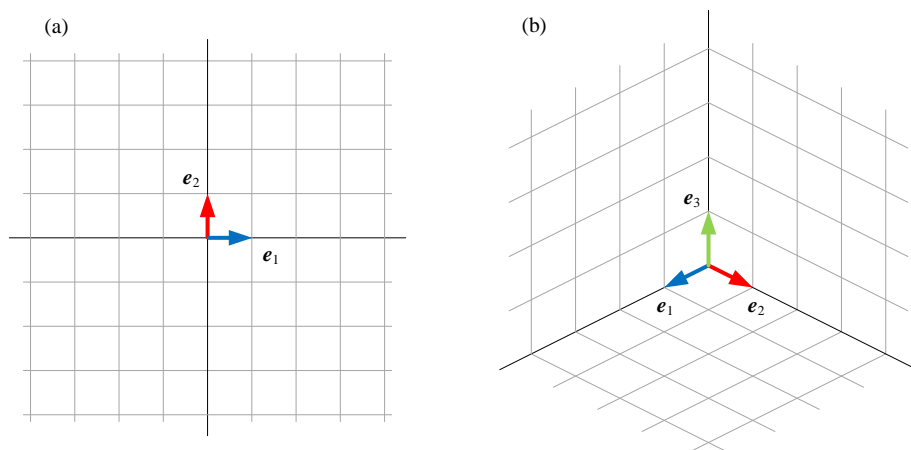


图 1. 二维和三维直角坐标系

### 向量空间

我们下面看一下向量空间的确切定义。

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  $\mathbf{u}$  和  $\mathbf{v}$ ，满足：

$$\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u} \quad (1)$$

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

$$(\mathbf{u} + \mathbf{v}) + \mathbf{w} = \mathbf{u} + (\mathbf{v} + \mathbf{w}) \quad (2)$$

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

$$\mathbf{v} + \mathbf{0} = \mathbf{v} \quad (3)$$

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  $\mathbf{v}$ , 选在  $V$  中的另外一个元素  $-\mathbf{v}$ , 满足:

$$\mathbf{v} + (-\mathbf{v}) = \mathbf{0} \quad (4)$$

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  $\mathbf{u}$  和  $\mathbf{v}$  满足:

$$k(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = k\mathbf{u} + k\mathbf{v} \quad (5)$$

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  $\mathbf{v}$ , 满足:

$$(k + t)\mathbf{v} = k\mathbf{v} + t\mathbf{v} \quad (6)$$

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  $\mathbf{v}$ , 满足:

$$(kt)\mathbf{v} = k(t\mathbf{v}) \quad (7)$$

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

$$1 \cdot \mathbf{v} = \mathbf{v} \quad (8)$$

注意, 以上公理不需要大家格外记忆!

## 线性组合

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

$$\alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \dots + \alpha_D \mathbf{v}_D \quad (9)$$

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。

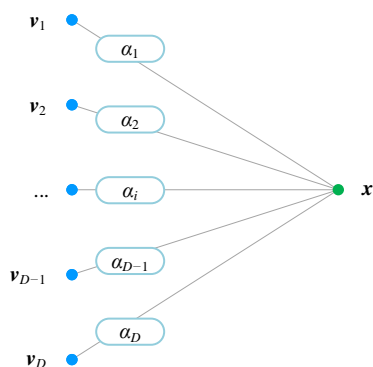


图 2. 线性组合

## 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** (span)，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，形容词组为 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。

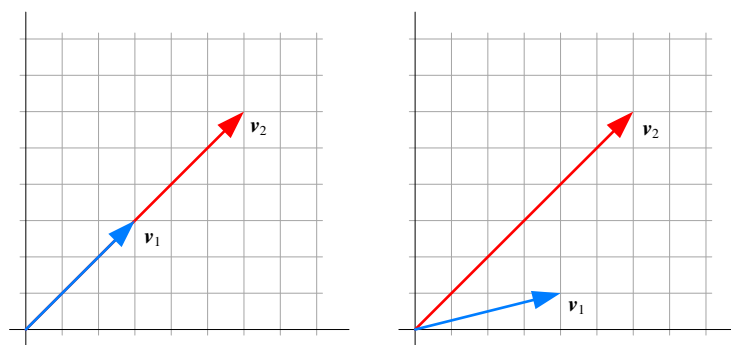


图 3. 平面上解释线性相关与线性无关

## 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  $X$  可以写成一组列向量：

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

对于  $V = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D\}$ ，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  $V = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D\}$  的秩，也称为  $V$  的维数或维度。

矩阵的列秩和行秩总是相等的，因此就叫它们为矩阵  $X$  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。当然，向量空间沿着子图中给定的直线、平面、空间无限延伸。

特别地，若矩阵  $X$  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。

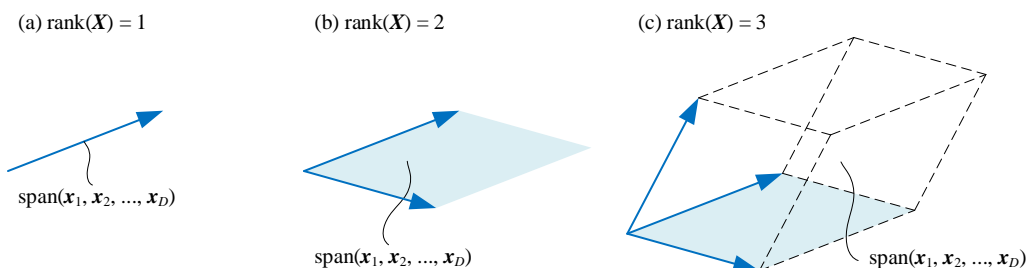


图 4.  $\text{rank}(X)$  的秩和  $\text{span}(X)$  的空间

此外，不要被矩阵的形状迷惑，如下四个矩阵的秩都是 1：

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{10 \times 1}, \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{bmatrix}_{10 \times 4}, [1 \quad 2 \quad 3 \quad 4] \quad (12)$$

`numpy.linalg.matrix_rank()` 计算矩阵的秩。

如果乘积  $AB$  存在， $AB$  的秩满足：

$$\text{rank}(AB) \leq \min(\text{rank}(A), \text{rank}(B)) \quad (13)$$

⚠ 请大家注意，仅当方阵  $A_{D \times D}$  满秩，即  $\text{rank}(A) = D$ ， $A$  可逆。

对于实数矩阵  $X$ ，以下几个矩阵的秩相等：

$$\text{rank}(X^T X) = \text{rank}(X X^T) = \text{rank}(X) = \text{rank}(X^T) \quad (14)$$

## 基底、基底向量

一个向量空间  $V$  的**基底向量** (basis vector) 指  $V$  中线性无关的  $v_1, v_2, \dots, v_D$ ，它们**张成** (span) 向量空间  $V$ ，即  $V = \text{span}(v_1, v_2, \dots, v_D)$ 。

而  $[v_1, v_2, \dots, v_D]$  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  $[v_1, v_2, \dots, v_D]$  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，起到定位作用。有了经纬度之后，地面上的任意一点都有唯一坐标。

这就是本节最开始说的， $\{e_1, e_2\}$  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  $x_1 e_1 + x_2 e_2$ 。而  $(x_1, x_2)$  就是在基底  $[e_1, e_2]$  下的坐标。

⚠ 注意区别  $\{e_1, e_2\}$  和  $[e_1, e_2]$ 。本书会用  $[e_1, e_2]$  表达有序基，也就是向量基底元素按“先  $e_1$  后  $e_2$ ”顺序排列。而  $\{e_1, e_2\}$  代表集合，集合中基底向量不存在顺序。此外，有序基  $[e_1, e_2]$  构造得到矩阵  $E$ 。不做特殊说明，本书中基底都默认是有序基。

## 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  $\dim()$ 。

显然，零向量  $0$  的张成的空间  $\text{span}(0)$  维数为 0。

图 1 (a) 中  $\mathbb{R}^2 = \text{span}(e_1, e_2)$ ，即  $\mathbb{R}^2$  维数  $\dim(\mathbb{R}^2) = 2$ ，而  $[e_1, e_2]$  的秩也是 2。

图 1 (b) 中  $\mathbb{R}^3 = \text{span}(e_1, e_2, e_3)$ ，即  $\mathbb{R}^3$  维数  $\dim(\mathbb{R}^3) = 3$ ， $[e_1, e_2, e_3]$  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 个维数为 1 的向量空间。从几何角度来看，这些向量空间都是直线。请大家特别注意，这些直线都经过原点  $0$ 。也就是说  $0$  分别在这些向量空间中。

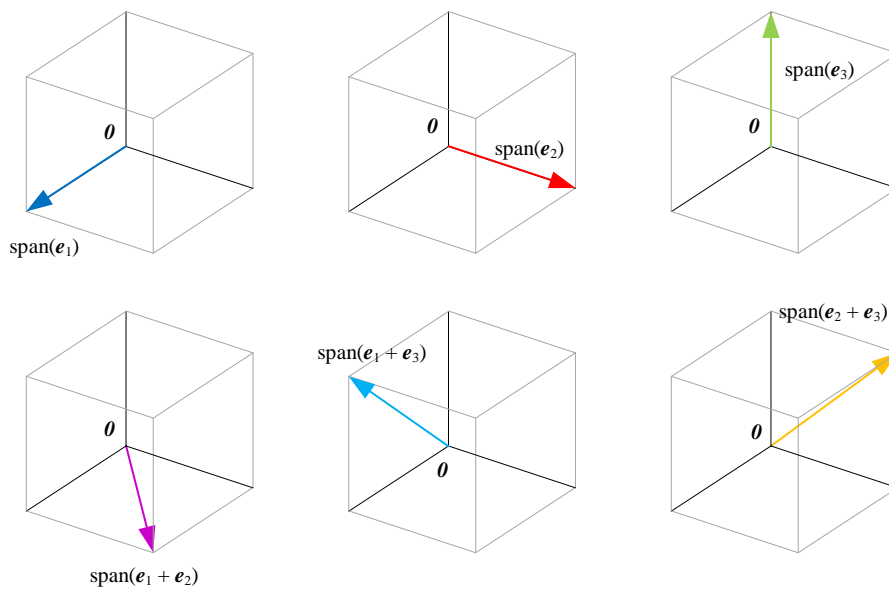


图 5. 维数为 1 的向量空间

图 6 所示为线性无关的向量张起的维数为 2 的向量空间。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，基底中的基底向量必须线性无关。

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

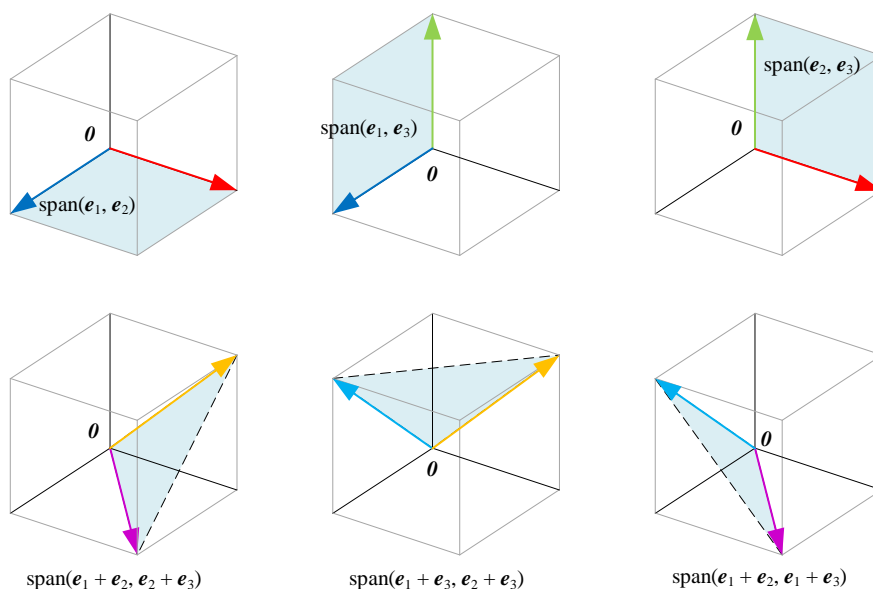


图 6. 维数为 2 的向量空间，张成空间的基底向量线性无关



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， $\text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$  张起的空间维数为 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。

基底中的基底向量必须线性无关。剔除掉冗余向量后， $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ 、 $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 、 $[\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$  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  $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$ 、 $[\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2]$  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，这是下文马上就要探讨的内容。

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  $\text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) = \text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2) = \text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + 2\mathbf{e}_2, 2\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$ 。在基底  $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$  中，任意一点的坐标唯一。但是，在  $\text{span}(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$  中，任意一点的坐标不定。

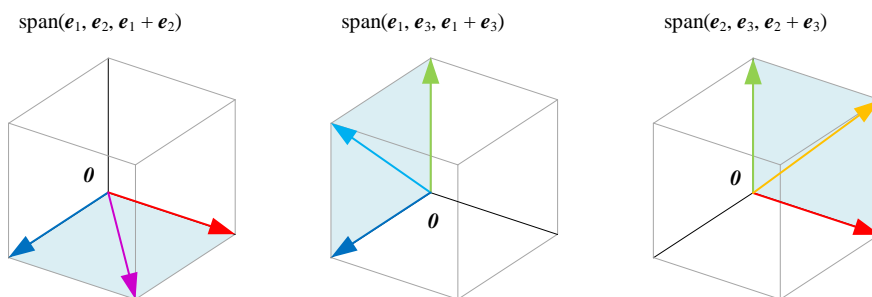


图 7. 维数为 2 的向量空间，张成空间的向量线性相关

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。

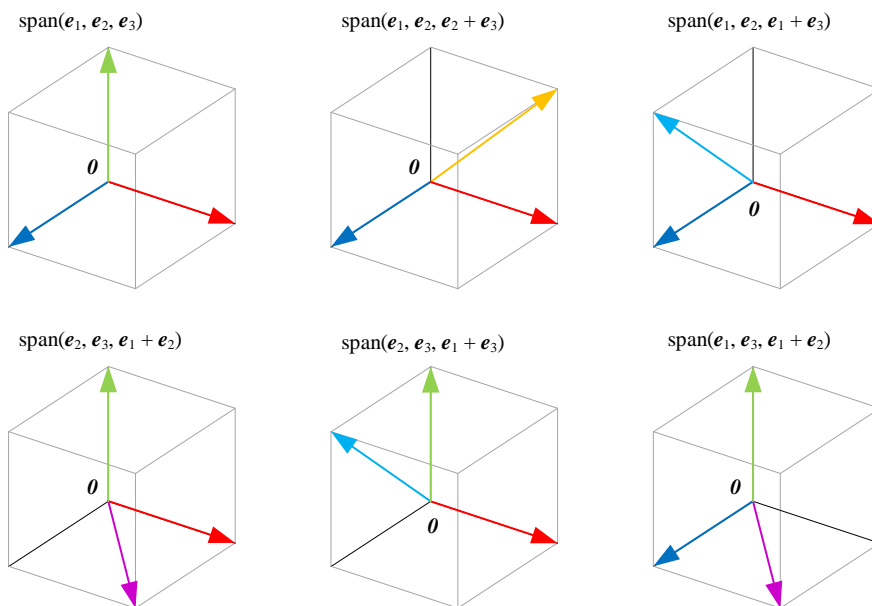


图 8. 维数为 3 的向量空间

## 过原点、仿射空间

“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  $\theta$  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  $\theta$  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)。

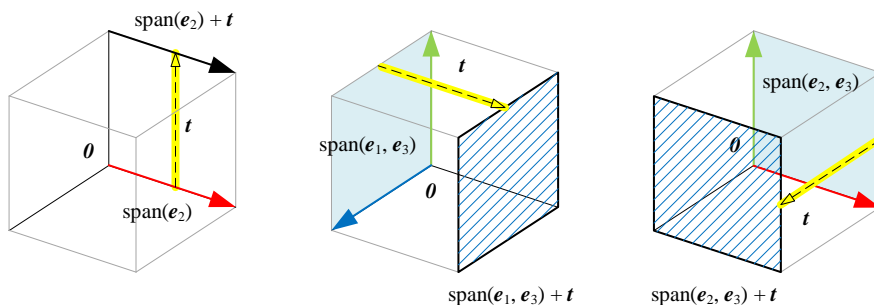


图 9. 向量空间平移得到仿射空间

## 基底选择并不唯一

$[e_1, e_2]$  只是平面  $\mathbb{R}^2$  无数基底中的一个。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  $\mathbb{R}^2 = \text{span}(e_1, e_2) = \text{span}(v_1, v_2) = \text{span}(w_1, w_2)$ 。

如图 10 所示，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。

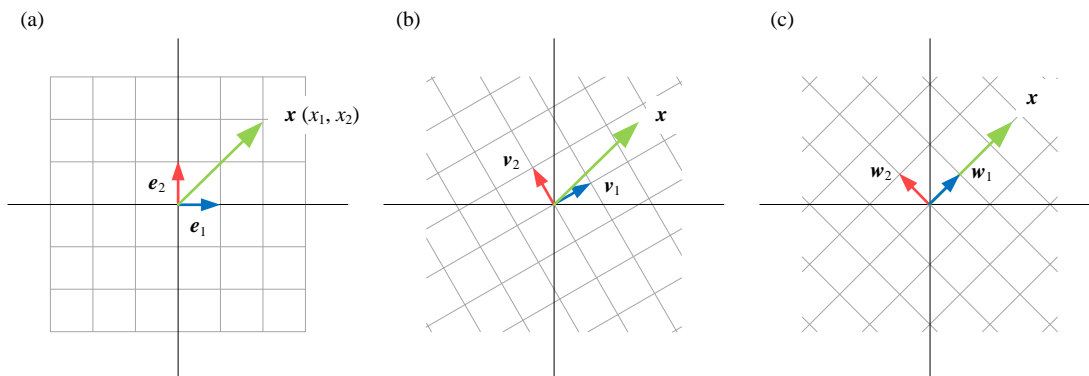


图 10. 向量  $x$  在三个不同的正交直角坐标系中位置

### 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, 即  $\|e_1\| = \|e_2\| = \|v_1\| = \|v_2\| = \|w_1\| = \|w_2\| = 1$ 。

且每组基底内基底向量相互正交, 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。

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

平面  $\mathbb{R}^2$  上, 任何两个不平行的非零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并非都正交, 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  $\mathbb{R}^2 = \text{span}(a_1, a_2) = \text{span}(b_1, b_2)$ 。

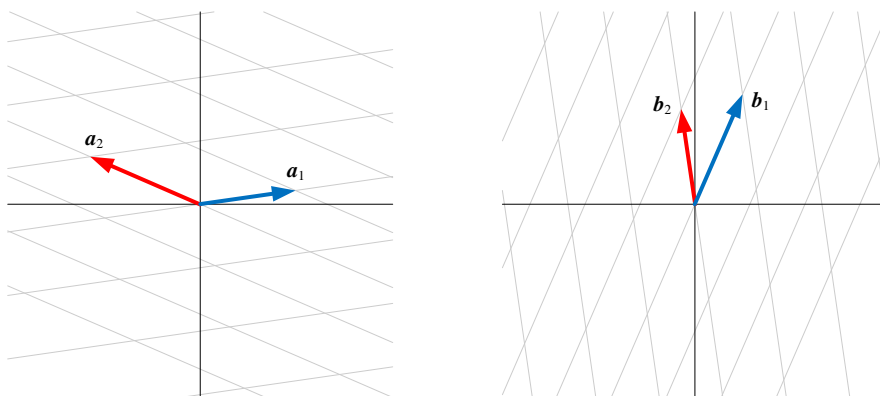


图 11. 二维平面的两个基底, 非正交

图 12 总结了几种基底之间的关系。

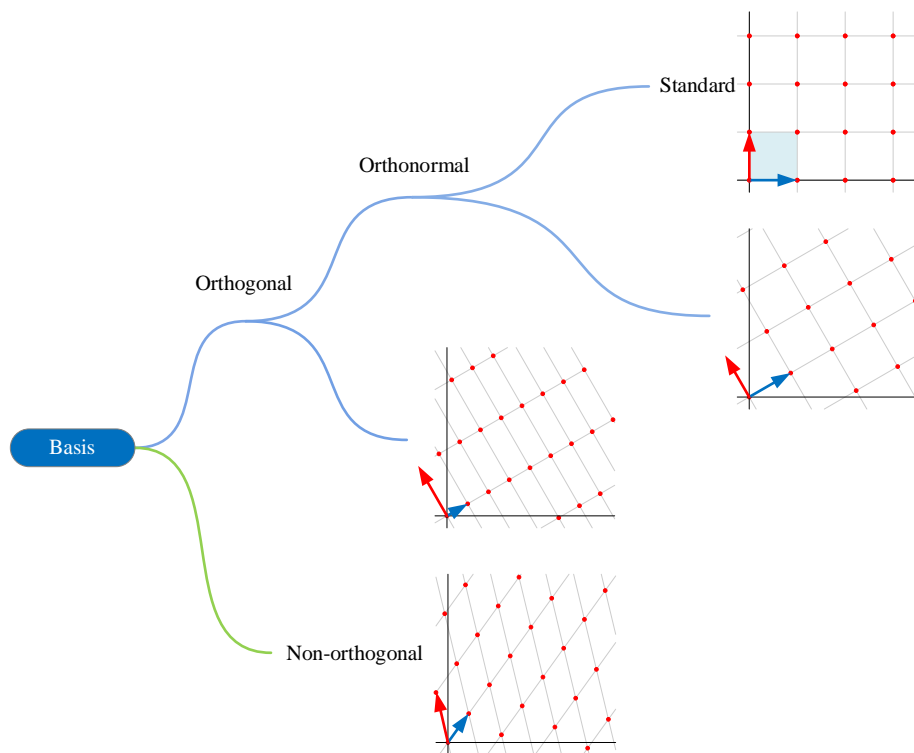


图 12. 几种基底之间的关系

## 基底转换

**基底转换** (change of basis) 完成不同基底之间变换，而标准正交基是常用的桥梁。

举个例子，如图 13 所示，给定如下平面直角坐标系中的一个向量  $a$ ，将其写成  $e_1$  和  $e_2$  的线性组合：

$$a = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = 2e_1 + 2e_2 \quad (15)$$

(2, 2) 就是向量  $a$  在基底  $[e_1, e_2]$  中的坐标。

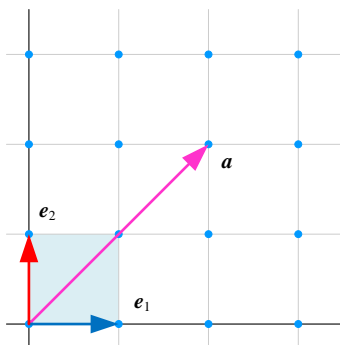
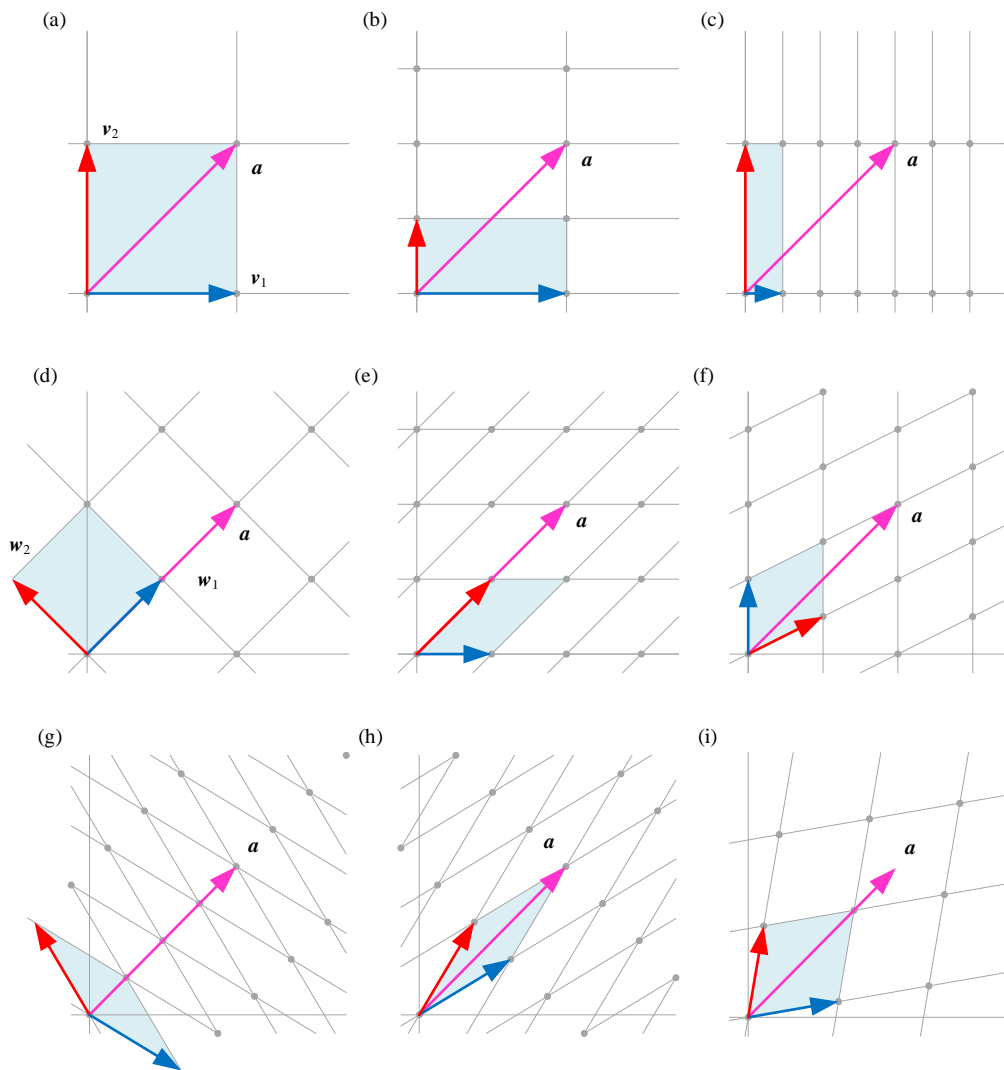


图 13. 平面直角坐标系中的一个向量  $a$ 

图 14 给出的是不同基底中表达的同一个向量  $a$ 。

图 14. 不同基底表达同一个向量  $a$ 

在图 13 这个正交标准坐标系中，任意一个向量  $x$  可以写成：

$$\underset{x}{x} = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = Ex \quad (16)$$

其中， $(x_1, x_2)$  代表向量  $x$  在基底  $[e_1, e_2]$  中的坐标值。

假设在平面上，另外一组基底为  $[v_1, v_2]$ ，而在这个基底中向量  $x$  的坐标为  $(z_1, z_2)$ ， $x$  可以写成  $v_1$  和  $v_2$  的线性组合：

$$x = z_1 v_1 + z_2 v_2 = [v_1 \ v_2] \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \quad (17)$$

令，

$$V = [v_1 \ v_2], \quad z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} \quad (18)$$

(17) 可以写成：

$$x = Vz \quad (19)$$

$z = [z_1, z_2]^T$  可以写成：

$$z = V^{-1}x \quad (20)$$

上式中， $2 \times 2$  矩阵  $V$  满秩，因此  $V$  可逆。

以图 14 (a) 为例， $V$  为：

$$V = [v_1 \ v_2] = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \quad (21)$$

向量  $a$  在图 14 (a)  $[v_1, v_2]$  这个基底下的坐标为：

$$z = V^{-1}x = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (22)$$

再举个例子，图 14 (d) 中  $W = [w_1, w_2]$  具体数值为：

$$W = [w_1 \ w_2] = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (23)$$

向量  $x$  在基底  $[w_1, w_2]$  可以写成：

$$x = Wy \quad (24)$$

其中， $y$  为向量  $x$  在  $[w_1, w_2]$  中坐标。

矩阵  $W$  也可逆，通过下式计算得到向量  $x$  在图 14 (d)  $[w_1, w_2]$  基底中的坐标：

$$y = W^{-1}x = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (25)$$

联立 (19) 和 (24)，得到：

$$Vz = Wy \quad (26)$$

因此，从坐标  $z$  到坐标  $y$  的转换，可以通过下式完成：

$$y = W^{-1}Vz \quad (27)$$

代入具体值，得到：

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \\ -0.5 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (28)$$

$z$   $y$



我们用 Streamlit 制作了一个应用，绘制图 14 不同“平行且等距网格”。大家可以改变矩阵  $A$  元素值，并让  $A$  作用于  $e_1$ 、 $e_2$ ，即  $Ae_1 = a_1$ 、 $Ae_2 = a_2$ 。 $e_1$  和  $e_2$  构造的是“方格”，而  $a_1$  和  $a_2$  构造的就是“平行且等距网格”。请大家参考 Streamlit\_Bk4\_Ch7\_01.py。

### 回顾 “猪引发的投影问题”

本系列丛书《数学要素》鸡兔同笼三步曲讲过向量向一个平面投影的例子。

如图 15 所示，农夫的需求  $y$  是 10 只兔、10 只鸡、5 只猪。 $w_1$  代表套餐 A —— 3 鸡 1 兔； $w_2$  代表套餐 B —— 1 鸡 2 兔。 $w_1$  和  $w_2$  张起 A-B 套餐”平面为  $H = \text{span}(w_1, w_2)$ 。而  $[w_1, w_2]$  便是  $H$  的基底。请大家自行验证基底  $[w_1, w_2]$  为非正交基。

图 15 中， $y$  向  $H$  投影结果为向量  $a$ 。

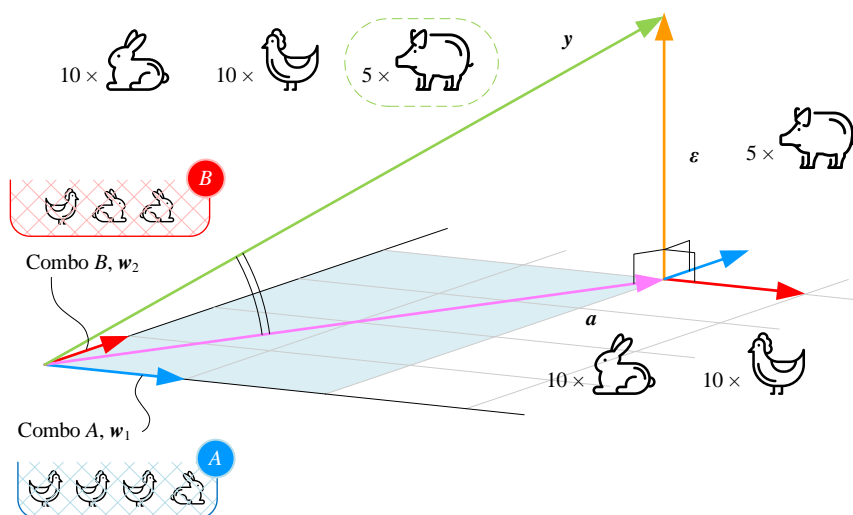


图 15. 农夫的需求和小贩提供的“A-B 套餐”平面存在 5 只猪的距离，来自本系列丛书《数学要素》

在二维平面  $H$  内， $a$  可以写成  $w_1$  和  $w_2$  的线性组合：

$$\mathbf{a} = \alpha_1 \mathbf{w}_1 + \alpha_2 \mathbf{w}_2 \quad (29)$$

$(\alpha_1, \alpha_2)$  则是  $\mathbf{a}$  在基底  $[\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2]$  中的坐标。显然， $\mathbf{a}$ 、 $\mathbf{w}_1$ 、 $\mathbf{w}_2$  线性相关。

$\mathbf{y}$  明显在平面  $H$  之外，不能用  $\mathbf{w}_1$ 、 $\mathbf{w}_2$  线性组合表达，从而  $\mathbf{y}$ 、 $\mathbf{w}_1$ 、 $\mathbf{w}_2$  线性无关。

$\mathbf{y}$  中不能被  $\mathbf{w}_1$  和  $\mathbf{w}_2$  表达成分为  $\mathbf{y} - \mathbf{a}$ ， $\mathbf{y} - \mathbf{a}$  垂直于  $H$  平面。这一思路可以用来解释线性回归最小二乘法 (ordinary least square, OLS)。

读完这个“巨长无比”的一节后，如果大家对于向量空间的相关概念还是云里雾里，不要怕。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理解向量空间。

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。

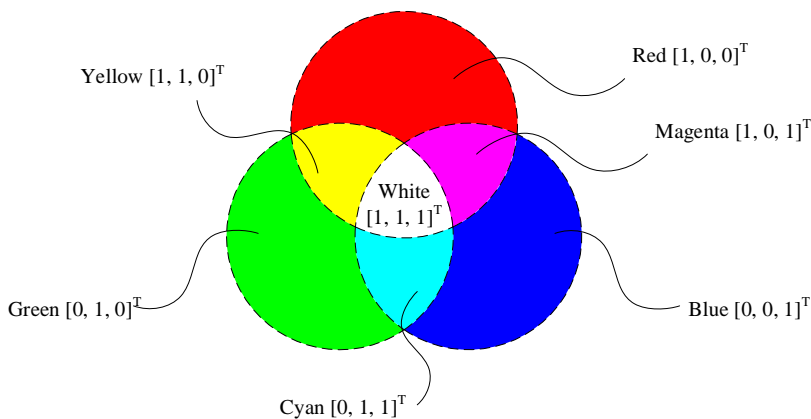


图 16. 三原色模型

如图 17 所示，在三原色模型这个空间中，任意一个颜色可以视作基底  $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3]$  中三个基底向量构成线性组合：

$$\alpha_1 \mathbf{e}_1 + \alpha_2 \mathbf{e}_2 + \alpha_3 \mathbf{e}_3 \quad (30)$$

其中， $\alpha_1$ 、 $\alpha_2$ 、 $\alpha_3$  取值范围都是  $[0, 1]$ 。



$e_1$  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 8 进制表示, 每个颜色分量为 0 ~ 255 之间整数。此外, RGB 也可以十六进制数来表达, 比如如上公式背景色用的浅蓝色对应的 16 进制数为 #DEEAF6。

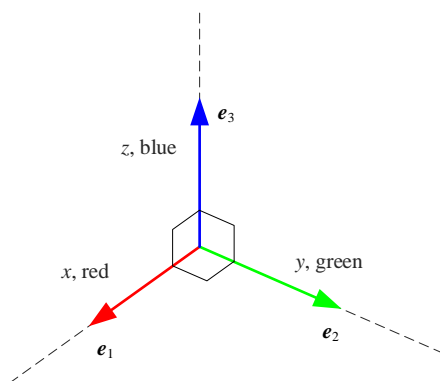


图 17. 三原色空间

$e_1$ 、 $e_2$  和  $e_3$  这三个基底向量两两正交, 因此它们两两内积为 0:

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

而且,  $e_1$ 、 $e_2$  和  $e_3$  均为单位向量:

$$\|e_1\|_2 = 1, \quad \|e_2\|_2 = 1, \quad \|e_3\|_2 = 1 \quad (33)$$

因此, 在三原色模型这个向量空间  $V$  中,  $[e_1, e_2, e_3]$  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  $\alpha_1$ 、 $\alpha_2$ 、 $\alpha_3$  有取值范围限制。而向量空间不存在这样的取值限制。除了零向量  $\mathbf{0}$  以外, 真正的向量空间都是无限延伸。

利用  $e_1$  ( $[1, 0, 0]^T$  red)、 $e_2$  ( $[0, 1, 0]^T$  green) 和  $e_3$  ( $[0, 0, 1]^T$  blue) 这三个基底向量, 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。

## 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  $\alpha_1$  取值范围为  $[0, 1]$ ， $\alpha_1$  乘  $e_1$  得到向量  $a$ ：

$$a = \alpha_1 e_1 \quad (34)$$

大家试想，在这个 RGB 三原色空间，(34) 意味着什么？

图 18 已经给出答案。标量  $\alpha_1$  乘向量  $e_1$ ，得到不同深度的红色。 $e_1$  张成的空间  $\text{span}(e_1)$  的维数为 1。向量空间  $\text{span}(e_1)$  是 RGB 三原色空间  $V$  的一个子空间。

类似地，标量  $\alpha_2$  乘向量  $e_2$ ，得到不同深浅的绿色。标量  $\alpha_3$  乘向量  $e_3$ ，得到不同深浅的蓝色。图 18 的三个空间的维数都是 1 维。

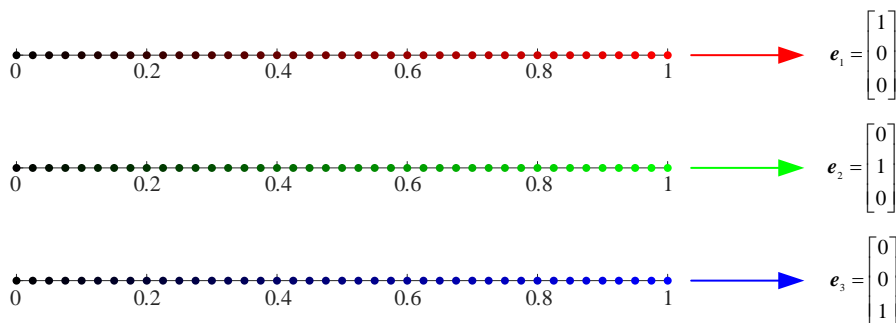


图 18. 三个基底向量和标量乘积

### 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：

$$a = \alpha_1 e_1 + \alpha_2 e_2 \quad (35)$$

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

虽然  $e_1$ 、 $e_2$ 、 $e_1 + e_2$  这三个向量线性相关，这三个向量也可张成图 19 这个二维空间。也就是说， $\text{span}(e_1, e_2) = \text{span}(e_1, e_2, e_1 + e_2)$ 。

集合  $\{e_1, e_2, e_1 + e_2\}$  中剔除  $e_2$  后  $[e_1, e_1 + e_2]$  线性无关。因此， $[e_1, e_1 + e_2]$  也可以选做图 19 这个空间的基底。也就是说，图 19 中任意颜色可以写成绿色 ( $e_1$ ) 和黄色 ( $e_1 + e_2$ ) 唯一的线性组合。

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。 $[e_1, e_3]$  是  $\text{span}(e_1, e_3)$  这个“红蓝”空间的基底。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。 $[e_2, e_3]$  是  $\text{span}(e_2, e_3)$  这个“蓝绿”空间的基底。注意  $e_2 + e_3$  为青色。

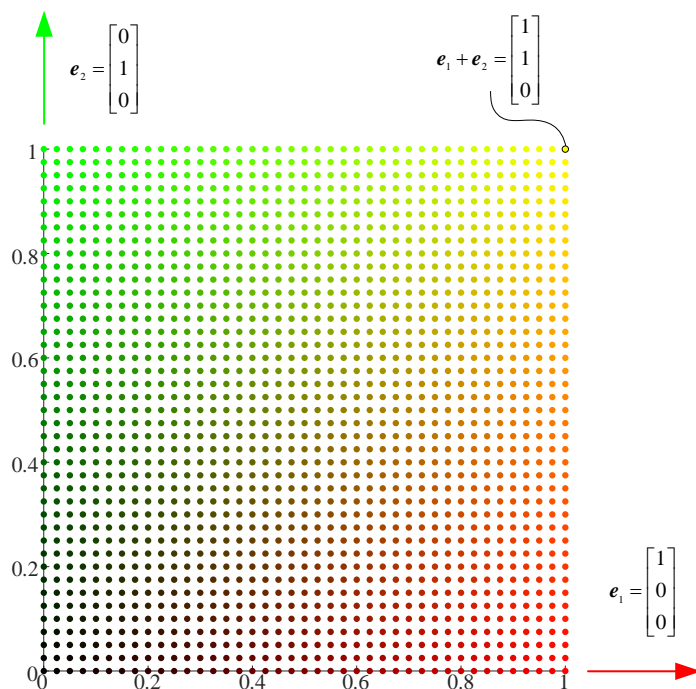
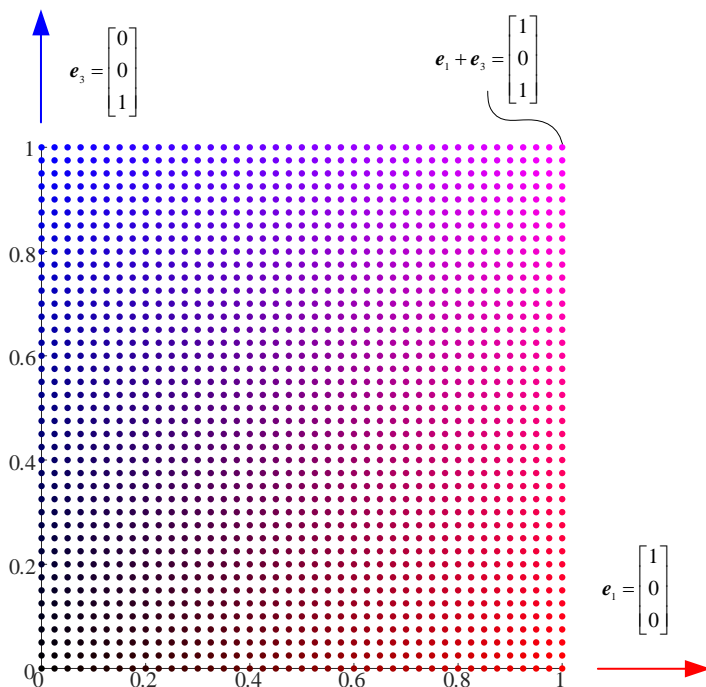


图 19. 基底向量  $e_1$  和  $e_2$  张成的空间



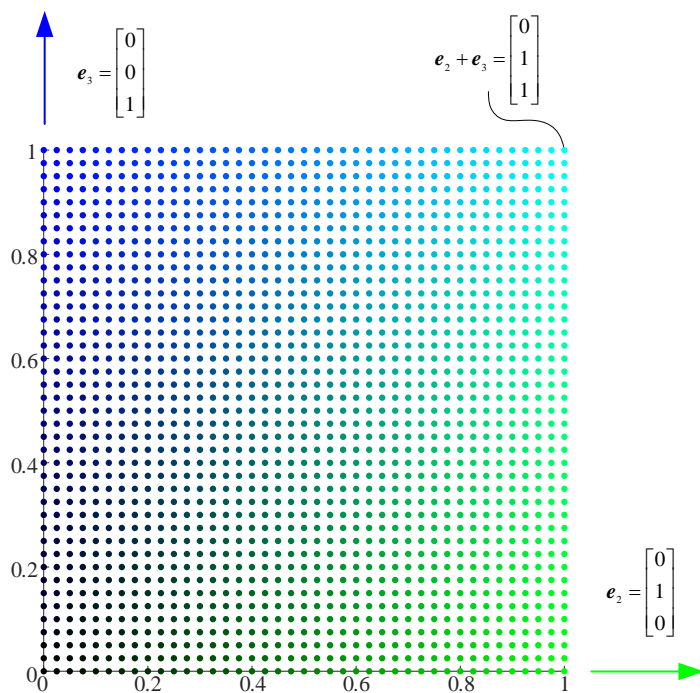
本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

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](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

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

$e_1$  ( $[1, 0, 0]^T$  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。 $\text{span}(e_1, e_2, e_3)$  这个空间的维数为 3。基底  $[e_1, e_2, e_3]$  中每个向量都是单位向量，且两两正交，因此基底  $[e_1, e_2, e_3]$  是标准正交基。

▲ 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。

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：

$$\alpha(e_1 + e_2 + e_3) \quad (36)$$

在图 22 中，这些灰度颜色在原点  $(0, 0, 0)$  和  $(1, 1, 1)$  两点构成的线段上。

如图 23 所示，白色和黑色分别对应如下向量：

$$1 \times (e_1 + e_2 + e_3) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad 0 \times (e_1 + e_2 + e_3) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (37)$$

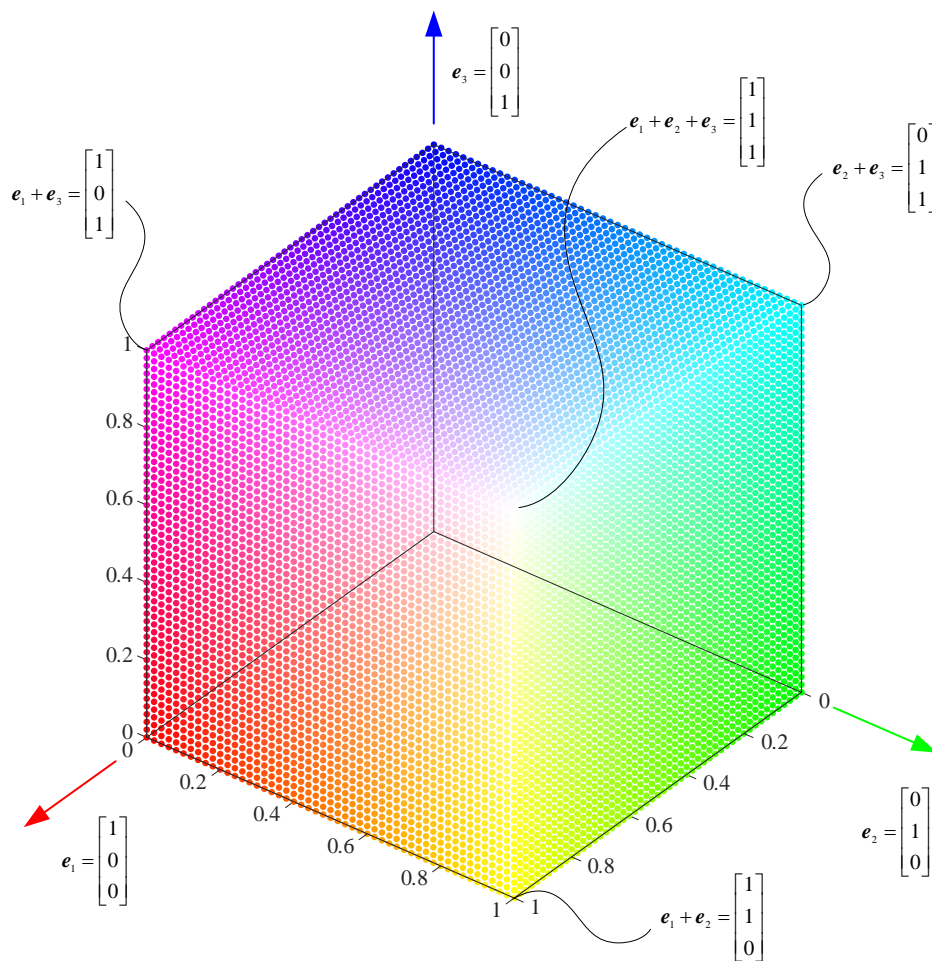


图 22. 三原色张成的彩色空间



图 23. 灰度

我们用 Streamlit 制作了一个应用，其中用 Plotly 绘制类似图 22 可交互三维散点图。请大家参考 Streamlit\_Bk4\_Ch7\_02.py。

## 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， $e_1$  (红色) 和  $e_2$  (绿色) 张成平面  $H_1 = \text{span}(e_1, e_2)$ 。在  $H_1$  中，向量  $\hat{a}$  与  $e_1$  和  $e_2$  线性相关；因为， $\hat{a}$  可以用  $e_1$  和  $e_2$  线性组合来表达：

$$\hat{a} = \alpha_1 e_1 + \alpha_2 e_2 \quad (38)$$

$e_3$  显然垂直  $H_1$ ，因此  $e_3$  和  $H_1$  互为**正交补** (orthogonal complement)。本书第 9 章还会深入介绍正交补这个概念。

图 24 中有一个不速之客——向量  $a$ 。向量  $a$  跳出平面  $H_1$ 。向量  $a$  与  $e_1$  和  $e_2$  线性无关，因为  $a$  不能用  $e_1$  和  $e_2$  线性组合构造。从色彩角度来看，红光和绿光，调不出青色光。

代表青色的向量  $a$  在红绿色构成的平面  $H_1$  内的投影为  $\hat{a}$ 。 $a - \hat{a}$  垂直  $H_1$ 。向量  $a$  和  $\hat{a}$  差在一束蓝光  $a - \hat{a}$ 。也就是，从光线合成角度来看， $a$  比  $\hat{a}$  多了一抹蓝光。

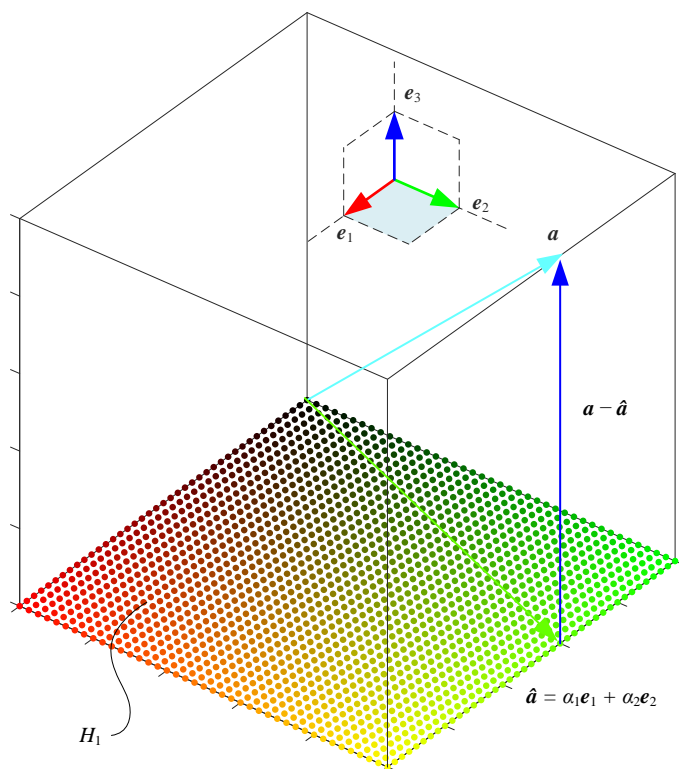
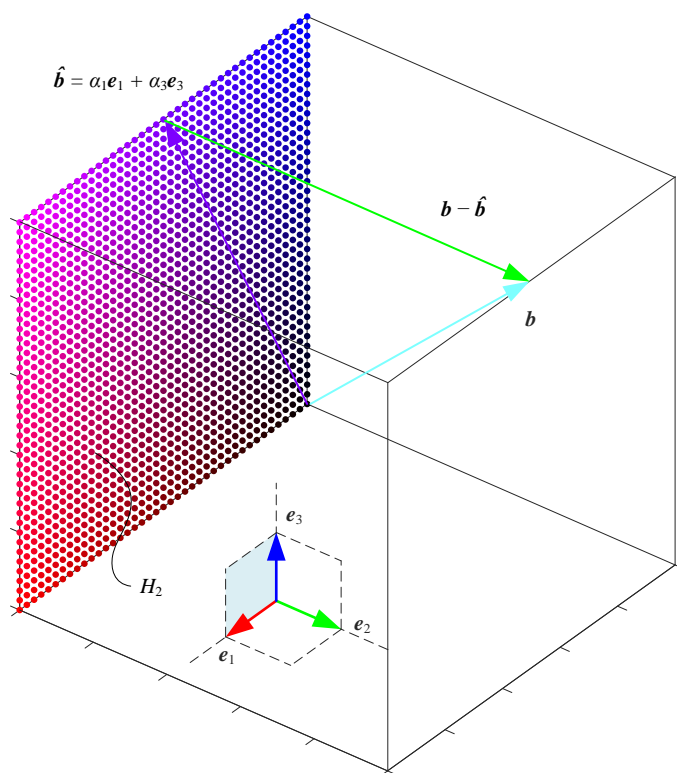
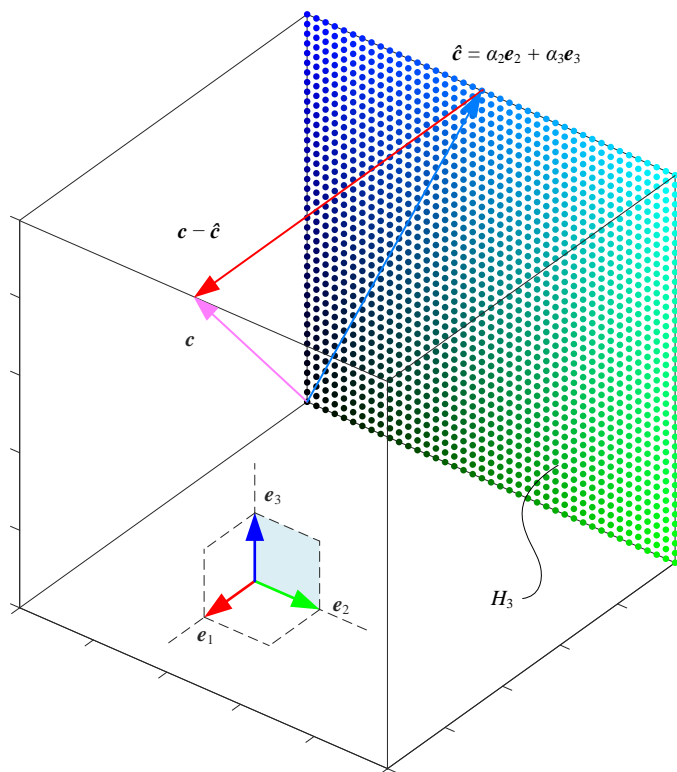


图 24. 基底向量  $e_1$  和  $e_2$  张成平面  $H_1$ ，向量  $a$  向  $H_1$  投影

图 25 所示为基底向量  $e_1$  和  $e_3$  张成平面  $H_2$ ，向量  $b$  向  $H_2$  投影得到  $\hat{b}$ 。图 26 所示为基底向量  $e_2$  和  $e_3$  张成平面  $H_3$ ，向量  $c$  向  $H_3$  投影结果为  $\hat{c}$ 。请大家自行分析这两幅图。

图 25. 基底向量  $e_1$  和  $e_3$  张成平面  $H_2$ 图 26. 基底向量  $e_2$  和  $e_3$  张成平面  $H_3$



## 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):

$$v_1 = e_2 + e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_2 = e_1 + e_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_3 = e_1 + e_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (39)$$

如图 27 所示,  $v_1$  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。

$v_1$ 、 $v_2$  和  $v_3$  线性无关, 因此  $[v_1, v_2, v_3]$  也可以是构造三维彩色空间的基底!

**印刷四色模式** (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。

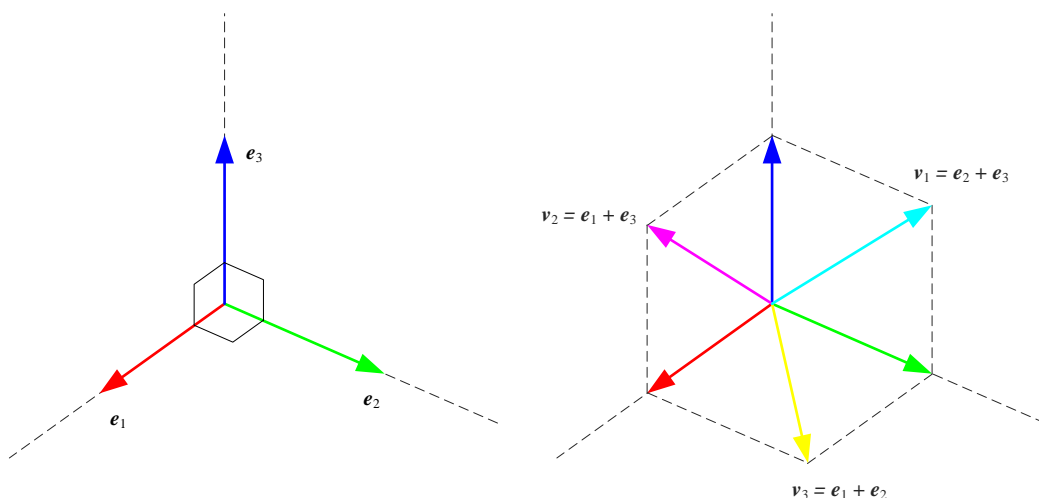


图 27. 正交基底到非正交基底

### 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  $60^\circ$ :



$$\begin{aligned}
 \cos \theta_{v_1, v_2} &= \frac{v_1 \cdot v_2}{\|v_1\| \|v_2\|} = \frac{1}{\sqrt{2} \times \sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\
 \cos \theta_{v_1, v_3} &= \frac{v_1 \cdot v_3}{\|v_1\| \|v_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2} \times \sqrt{2}} = \frac{1}{2} \\
 \cos \theta_{v_2, v_3} &= \frac{v_2 \cdot v_3}{\|v_2\| \|v_3\|} = \frac{1}{\sqrt{2} \times \sqrt{2}} = \frac{1}{2}
 \end{aligned} \tag{40}$$

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。

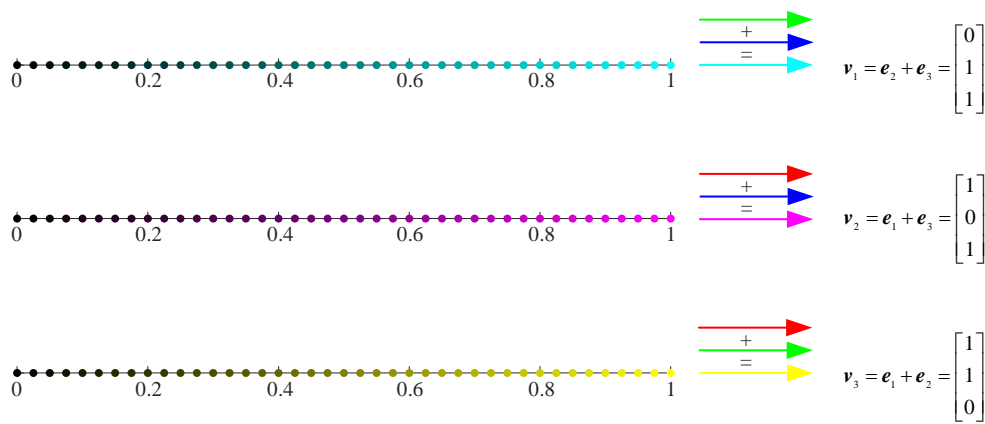
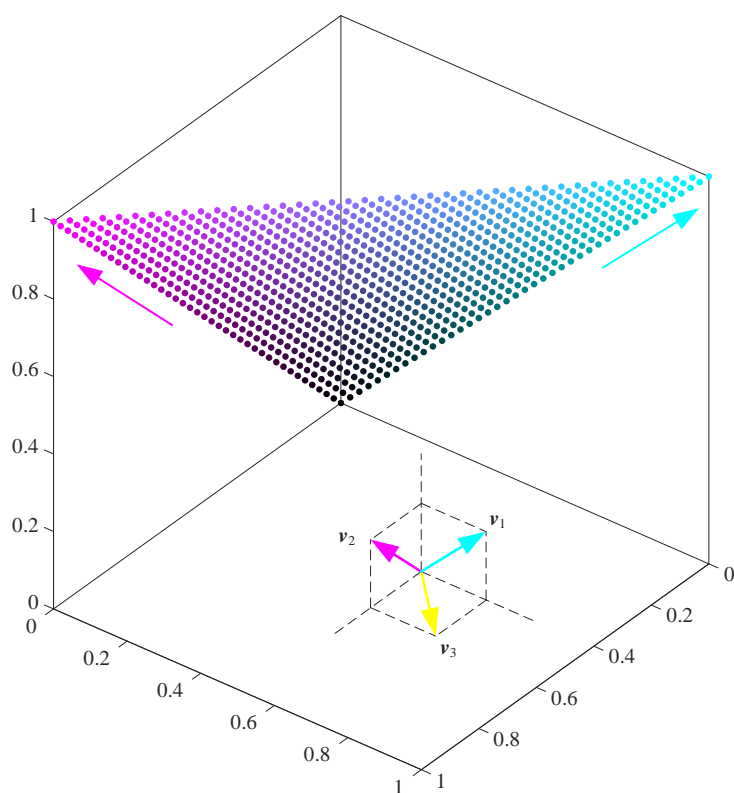
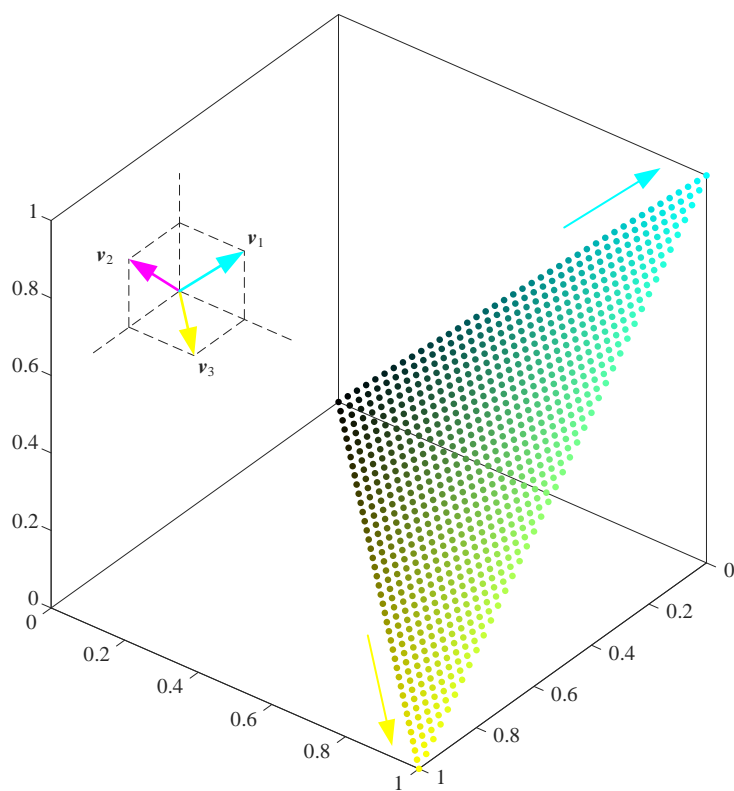
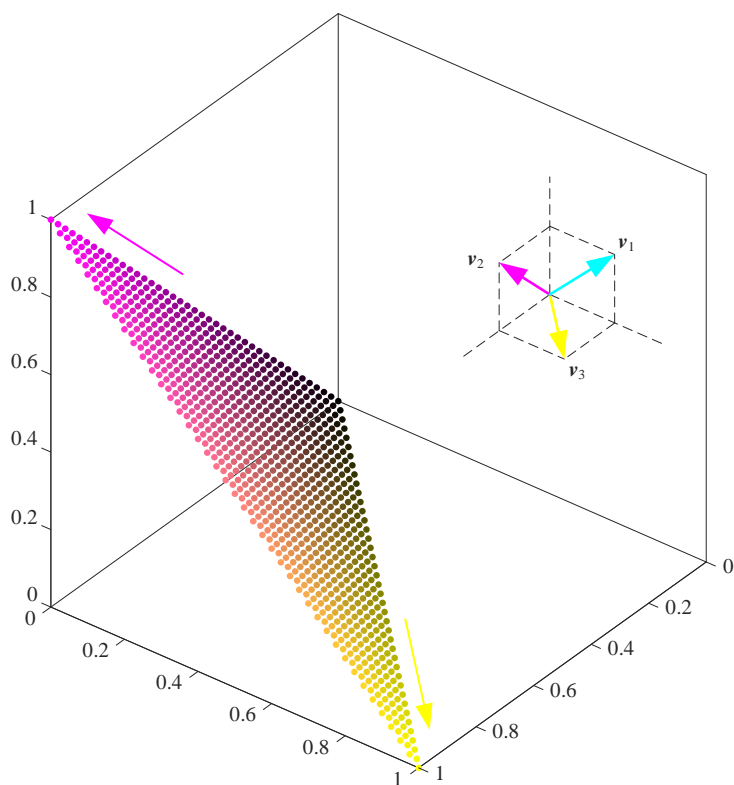


图 28. 单色子空间

## 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

## 7.6 基底转换：从红、绿、蓝，到青色、品红、黄色

RGB 色卡中， $[e_1, e_2, e_3]$  是色彩空间的标准正交基。CMYK 色卡中， $[v_1, v_2, v_3]$  是色彩空间的非正交基。我们可以用**基底转换** (change of basis) 完成 RGB 模式向 CMYK 模式转换。

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  $[v_1, v_2, v_3]$ ：

$$[v_1 \ v_2 \ v_3] = A[e_1 \ e_2 \ e_3] \quad (41)$$

$A$  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：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (42)$$

即矩阵  $A$  为：

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

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：

$$A^{-1} [v_1 \ v_2 \ v_3] = [e_1 \ e_2 \ e_3] \quad (44)$$

通过计算可得到  $A^{-1}$ ：

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} -0.5 & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & -0.5 \end{bmatrix} \quad (45)$$

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。

注意，在印刷领域，真实的 RGB 和 CMYK 之间的转换要比上述转换复杂的多。

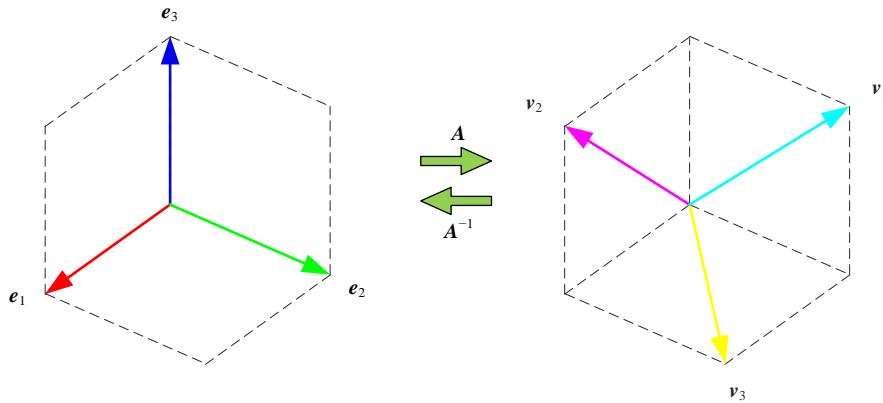


图 32. 基底  $[e_1, e_2, e_3]$  和基底  $[v_1, v_2, v_3]$  相互转换

## 线性方程组

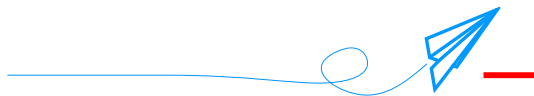
“纯红色”在基底  $[v_1, v_2, v_3]$  的坐标可以通过求解下列线性方程组得到：

$$Ax = b \Rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (46)$$

而这线性方程组本身就是一个线性组合：

$$[v_1 \ v_2 \ v_3] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = x_1 v_1 + x_2 v_2 + x_3 v_3 = b \quad (47)$$

请大家自己计算“纯绿色”、“纯蓝色”在基底  $[v_1, v_2, v_3]$  中的坐标。



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

选出以下四幅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。

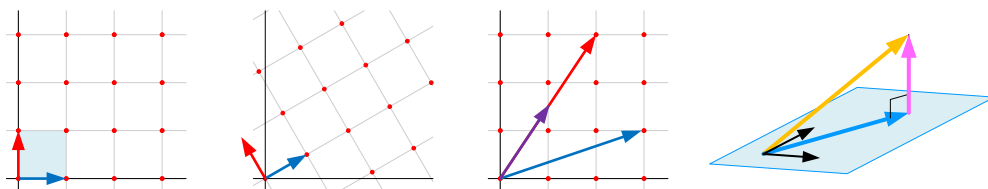


图 33. 总结本章重要内容的四幅图