Vector Norm **向量范数**欧几里得距离的延伸



数学领域, 遇到理解不了的概念别怕, 用习惯就好了。

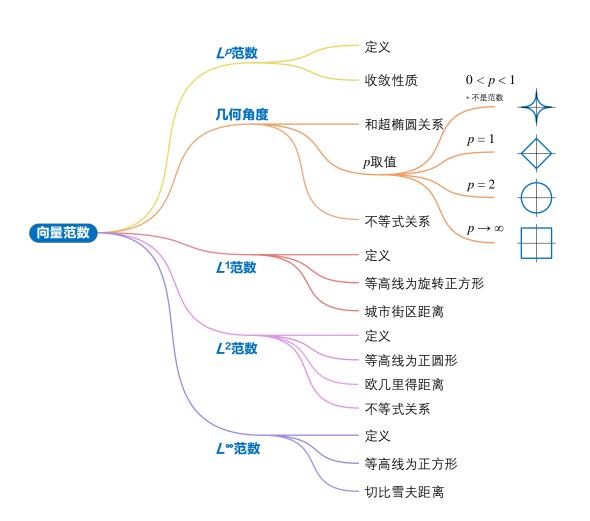
In mathematics, you don't understand things. You just get used to them.

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



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





3.1 *L*"范数: *L*2范数的推广

上一章介绍了 L^2 范数, L^2 范数代表向量的长度,也叫向量的模,等价于欧几里得距离。本章将 L^2 范数推广到 L^p 范数。

给定如下列向量x:

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

向量x的 L^p 范数定义为:

$$\|\mathbf{x}\|_{p} = (|x_{1}|^{p} + |x_{2}|^{p} + \dots + |x_{D}|^{p})^{1/p} = (\sum_{j=1}^{D} |x_{j}|^{p})^{1/p}$$
 (2)

(2) 中 $|x_i|$ 计算 x_i 的绝对值。另外,很多教材将 L^p 范数写成 Lp 范数或 p-范数。

对于 L^p 范数, $p \ge 1$ 。p < 1 时,虽然上式有定义,但是不能称之为范数。容易判断, L^p 范数 非负,即 $\|x\|_{\infty} \ge 0$ 。 L^p 范数代表"距离",也一种"向量 \to 标量"的运算规则。

两个特殊范数

当 p=2 时,向量 x 的 L^p 范数便是 L^2 **范数** (L2-norm),也叫 2-范数,具体定义为:

$$\|\mathbf{x}\|_{2} = \sqrt{x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + \dots + x_{D}^{2}} = \left(\sum_{j=1}^{D} x_{j}^{2}\right)^{\frac{1}{2}}$$
 (3)

(3) 中 $\|\mathbf{x}\|_{1}$ 的下角标常被省略,也就是说 $\|\mathbf{x}\|$ 默认为 L^{2} 范数。

特别地, 当 p 趋向+ ∞ 时, 对应的范数记成 L^{∞} 。 L^{∞} 范数定义为:

$$\|x\|_{x} = \max(|x_1|, |x_2|, \dots, |x_D|)$$
 (4)

即, $\|x\|_{\infty}$ 为 $|x_j|$ 中的最大值。

大小关系

举个例子,如图1所示,给定向量x:

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

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

$$\|x\|_{1} = |1| + |2| + |3| = 6$$
 (6)

 L^2 范数是图 1 向量 x 的长度:

$$\|\mathbf{x}\|_{2} = (|\mathbf{l}|^{2} + |2|^{2} + |3|^{2})^{1/2} = (14)^{1/2} \approx 3.742$$
 (7)

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

向量x的 L^3 范数可以通过下式求得:

$$\|\mathbf{x}\|_{3} = (|\mathbf{1}|^{3} + |\mathbf{2}|^{3} + |\mathbf{3}|^{3})^{1/3} = 36^{1/3} \approx 3.302$$
 (8)

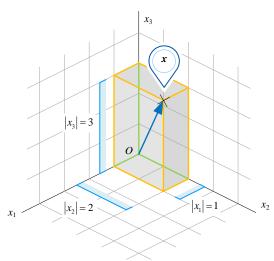


图 1. 向量 x 在三维直角坐标系的位置

类似地, 计算向量x的 L^4 范数:

$$\|\mathbf{x}\|_{4} = (|1|^{4} + |2|^{4} + |3|^{4})^{1/4} = 98^{1/4} \approx 3.1463$$
 (9)

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

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} = \max(|\mathbf{1}|, |2|, |3|) = 3$$
 (10)

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

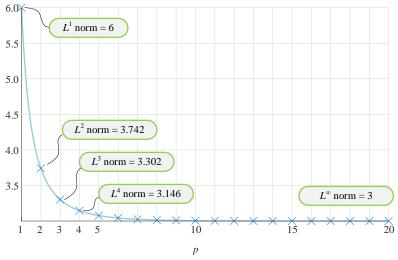


图 2. LP 范数随 p 变化

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

本书配套徽课视频均发布在 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

白话说, L^p 范数丈量一个向量的"大小"。p 取值不同时,丈量的方式略有差别。比如,p=1 时,我们用向量各个元素绝对值之和代表向量"大小"。p=2 时,我们用欧氏距离代表向量"大小"。当 p 趋向 $+\infty$ 时,我们仅仅用向量各个元素绝对值中最大值代表向量"大小"。

在数据科学、机器学习算法中, L^p 范数扮演重要角色,比如距离度量、正则化(regularization)。下一节开始,我们就从几何图像入手,深入分析 L^p 范数性质。

3.2 L°范数和超椭圆的联系

给定列向量 $\mathbf{x} = [x_1, x_2]^T$, \mathbf{x} 的 L^p 范数为:

$$\|\mathbf{x}\|_{p} = (|x_{1}|^{p} + |x_{2}|^{p})^{1/p}$$
 (11)

▲ 再次请大家注意, 0 < p < 1 时, (11) 不能叫范数, 因为不满足次可加。

当 p 一定时,将 (11) 写成二元函数 $f(x_1, x_2)$:

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

大家可能早已发现上式和《数学要素》一册讲过的超椭圆有着千丝万缕的联系。图 3 所示为 p 取不同值时, $f(x_1, x_2)$ 函数对应曲面等高线变化。图中,暖色系代表函数 $f(x_1, x_2)$ 更大数值,冷色系对应 $f(x_1, x_2)$ 较小数值。

p=1 时, $f(x_1,x_2)$ 函数的等高线为旋转正方形:

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

p=2 时, $f(x_1,x_2)$ 函数等高线为正圆:

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

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

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



Bk4 Ch3 01.py 绘制图3所示等高线。

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

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

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} \le \|\mathbf{x}\|_{1} \le \|\mathbf{x}\|_{1} \tag{16}$$

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

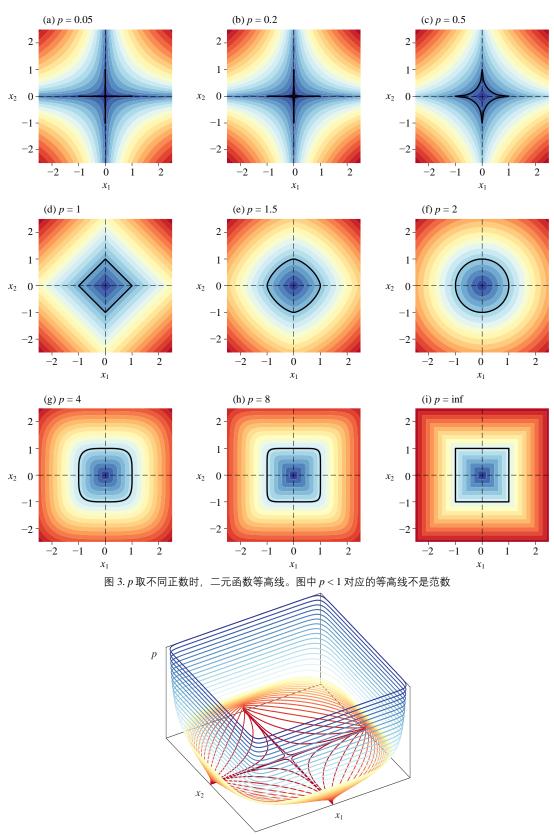


图 4. 随着 p 增大,等高线一层层包裹。图中 p < 1 对应的等高线不是范数

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

凸凹性

 $p \geq 1$ 时, L^p 范数等高线形状为**凸** (convex)。这是范数的一个重要性质——**次可加性** (subadditivity),也叫**三角不等式** (triangle inequality):

$$\|x + y\|_{p} \le \|x\|_{p} + \|y\|_{p}$$
 (17)

上式又叫做闵可夫斯基不等式 (Minkowski inequality)。

0 时,(2) 对应等高线形状如图 5,它非凸也非凹。严格来说,<math>0 时,(2) 虽然有定义,但是不能称之为范数。这是因为,<math>0 时,(2) 不满足次可加性,即违反三角不等式。

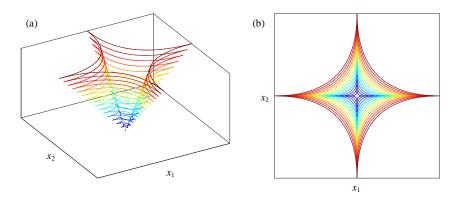


图 5. p = 0.5, L^p 范数等高线图像

p 为负数

p 取负数时,(12) 也有定义,但是我们不能称之为范数。图 6 所示为 p 取不同负数时,(12) 中函数等高线形状变化。



在 Bk4_Ch3_01.py 基础上,我们用 Streamlit 制作了一个应用,用 Plotly 绘制可交互平面等高 线、三维曲面,展示 L^p 范数对应函数随 p 变化。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch3_01.py。

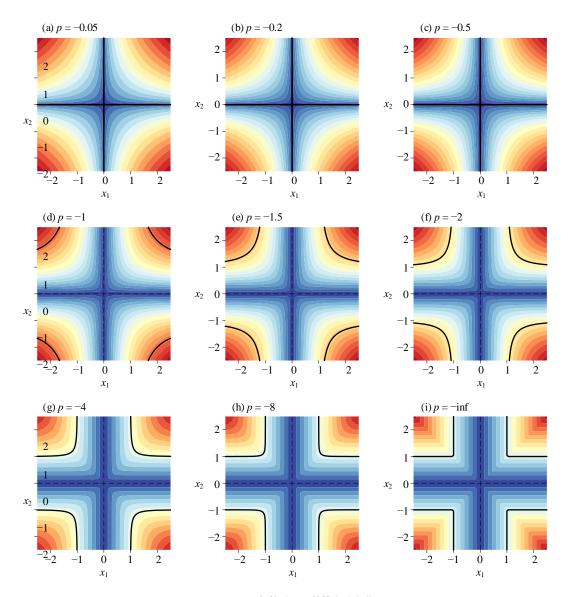


图 6. p 取不同负数时,函数等高线变化

3.3 *L*¹范数: 旋转正方形

本节探讨 L^1 范数几何特征。向量 x 的 L^1 范数定义为:

$$\|\boldsymbol{x}\|_{1} = |x_{1}| + |x_{2}| + \dots + |x_{D}| = \sum_{j=1}^{D} |x_{j}|$$
 (18)

当 D=2 时,向量 x 的 L^1 范数为:

$$\|\mathbf{x}\|_{1} = |x_{1}| + |x_{2}|$$
 (19)

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

本书配套徽课视频均发布在 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

(19) 中 L^{1} 范数等于 1 时, 得到解析式:

$$|x_1| + |x_2| = 1 (20)$$

下面, 我分成几种情况展开(20), 并绘制图像。

几何图形

观察 (20) 可以发现, x_1 和 x_2 的取值范围均为 [-1, 1], x_1 和 x_2 符号可正可负。为了去掉绝对值 符号,分四种情况考虑,得到如下展开式:

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

$$(21)$$

根据(21)定义的四个一次函数解析式,可以得到图7所示图形。

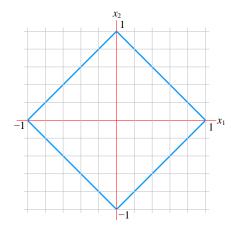


图 7. $|x_1| + |x_2| = 1$ 解析式图像

图 8 所示为如下函数的等高线图像:

$$f(x_1, x_2) = |x_1| + |x_2| \tag{22}$$

图 8(b) 中每一条等高线上的点距离原点有相同的 L^1 范数。

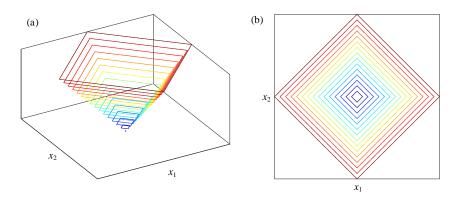


图 8.p = 1 时, L^p 范数等高线图像



L¹ 范数也叫城市街区距离 (city block distance),也称曼哈顿距离 (Manhattan distance)。

如图9所示,一个城市街区布局方方正正,从A点到B点的行走距离不可能是两点的直线距离,即欧氏距离。图中给出的行走路径类似 L^1 范数。

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

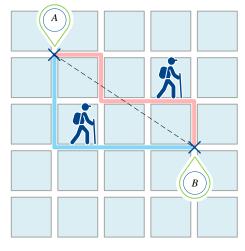


图 9. 城市街区距离

3.4 **L²范数: 正圆**

本节探讨 L^2 范数形状。向量 x 的 L^2 范数定义为:

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

本书配套徽课视频均发布在 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

$$\|\mathbf{x}\|_{2} = (x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + \dots + x_{D}^{2})^{1/2} = (\sum_{j=1}^{D} |x_{j}|^{2})^{1/2}$$
 (23)

特别地, 当 D=2 时, 向量 x 的 L^2 范数为:

$$\|\mathbf{x}\|_{2} = \sqrt{x_{1}^{2} + x_{2}^{2}} \tag{24}$$

从距离度量角度, L^2 范数为欧几里得距离。

几何图形

(24) 中 L² 范数等于 1 时,对应图像为单位圆,解析式为:

$$x_1^2 + x_2^2 = 1 ag{25}$$

图 10 所示为 (25) 图像。

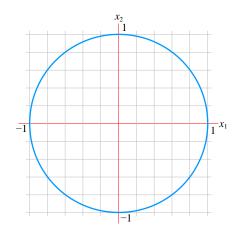


图 10. $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 解析式图像

另外,实践中也经常使用 L^2 范数的平方,比如,

$$\|\mathbf{x}\|_{2}^{2} = x_{1}^{2} + x_{2}^{2} \tag{26}$$

再次强调范数、向量内积、矩阵乘法关系,对于列向量x,以下运算等价,结果都是标量:

$$\|\mathbf{x}\|_{2}^{2} = \|\mathbf{x}\|^{2} = \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} \mathbf{x}$$
(27)

图 11 所示为当 D=3 时, p 分别取 1 和 2 时, L^p 范数对应的几何体。

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

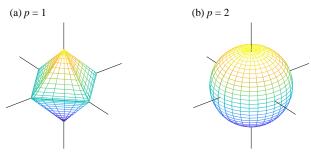
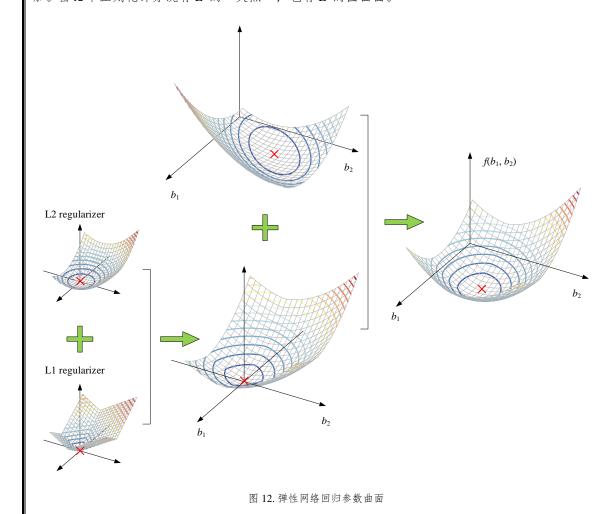


图 11.p=1、2, D=3 时, L^p 范数对应的几何体



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

我们这里在介绍另外一种正则化回归——**弹性网络回归** (elastic net regression)。弹性网络回归以不同比例同时引入 L^1 和 L^2 正则项。图 12 所示,正则化曲面是 L^1 和 L^2 范数曲面按不同比例叠加。图 12 中正则化部分既有 L^1 的"尖点",也有 L^2 的凸曲面。



本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

本书配套徽课视频均发布在 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

不等式

相信大家都知道,三角形两边之和大于第三边。应用到向量 L^2 范数,对应如下不等式:

$$\|u\|_{2} + \|v\|_{2} \ge \|u + v\|_{2}$$
 (28)

举个例子,给定向量u和v:

$$\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} 4 & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} -2 & 4 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$
 (29)

向量u和v两者之和为:

$$\mathbf{u} + \mathbf{v} = \begin{bmatrix} 4 & 3 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} + \begin{bmatrix} -2 & 4 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2 & 7 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$$
 (30)

图 13 所示为向量 u 和 v 以及 u+v 在平面上的关系。

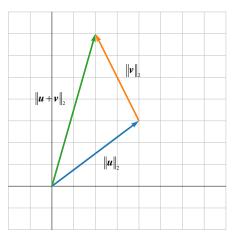


图 13. 向量 u 和 v 以及两者之和

u 和 v 的 L^2 范数分别为:

$$\|\mathbf{u}\|_{2} = \sqrt{4^{2} + 3^{2}} = 5, \quad \|\mathbf{v}\|_{2} = \sqrt{(-2)^{2} + 4^{2}} = \sqrt{20} \approx 4.4721$$
 (31)

u 和 v 的 L^2 范数和为:

$$\|\mathbf{u}\|_{2} + \|\mathbf{v}\|_{2} \approx 9.4721$$
 (32)

u + v的 L^2 范数为:

$$\|\mathbf{u} + \mathbf{v}\|_{2} = \sqrt{2^{2} + 7^{2}} = \sqrt{54} \approx 7.2801$$
 (33)

显然, (28) 成立。请大家自行验证,满足 $p \ge 1$ 时,当 p 取不同值时, L^p 范数都满足这种三角不等式关系。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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



Bk4 Ch3 02.py 绘制图13图11。

3.5 **L** 范数: 正方形

向量x的 L^{∞} 范数的定义为:

$$\|x\|_{\infty} = \max(|x_1|, |x_2|, \dots, |x_D|)$$
 (34)

上式也叫做切比雪夫距离 (Chebyshev distance)。

当特征数 D=2 时,向量 x 的 L^{∞} 范数定义为:

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} = \max\left(|x_1|, |x_2|\right) \tag{35}$$

当 L^{∞} 范数等于 1 时,可以得到如下平面图形解析式:

$$\max\{|x_1|, |x_2|\} = 1 \tag{36}$$

借助《数学要素》第8、9章讲解的圆锥曲线知识,我们一起推导(36)解析式对应的图像。

几何图形

观察 (36) 可以发现, x_1 和 x_2 的取值范围均为 [-1, 1], x_1 和 x_2 符号可正、可负。分情况讨论, 得到解析式:

$$\begin{cases}
|x_1| = 1 & |x_1| > |x_2| \\
|x_2| = 1 & |x_2| > |x_1|
\end{cases}$$
(37)

为了进一步展开 (37),需要分析 $|x_1|$ 和 $|x_2|$ 大小关系。如果, $|x_1|>|x_2|$,不等式两边平方,并整理得到:

$$x_1^2 - x_2^2 > 0 (38)$$

当把大于号 > 换成等号 = 时,得到下式:

$$x_1^2 - x_2^2 = 0 (39)$$

可以很容发现, (39) 为蜕化双曲线, 图形为图 14 所示蓝色线。(38) 所示的不等式区域对应的 是图 14 所示阴影区域。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

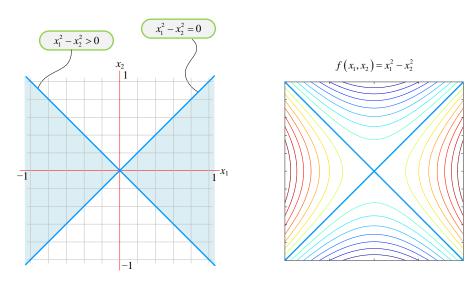


图 14. 蜕化双曲线及不等式区域

根据以上区域划分, 改写 (37) 得到:

$$\begin{cases} x_1 = \pm 1 & x_1^2 - x_2^2 > 0 \\ x_2 = \pm 1 & x_1^2 - x_2^2 < 0 \end{cases}$$
(40)

由于 x_1 和 x_2 的取值范围均为 [-1, 1],所以在图 14 所示阴影区域中,图像为两条竖直线段 ($x_1 = \pm 1$);类似地,在 $x_1^2 - x_2^2 < 0$ 对应区域中,图像为两条水平线段 ($x_2 = \pm 1$)。

综合以上分析,可以得到(36)对应的图像,具体如图15所示。

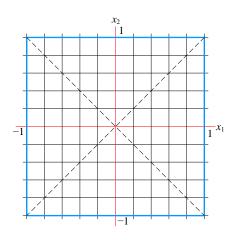


图 15. $\max\{|x_1|, |x_2|\}=1$ 解析式图像

3.6 再谈距离度量

把(2)写成x和q两个列向量之差的 L^p 范数,可以得到:

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

本书配套徽课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: https://space.bilibili.com/513194466

$$\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_{p} = \left(\left|x_{1} - q_{1}\right|^{p} + \left|x_{2} - q_{2}\right|^{p} + \dots + \left|x_{D} - q_{D}\right|^{p}\right)^{1/p} = \left(\sum_{j=1}^{D} \left|x_{j} - q_{j}\right|^{p}\right)^{1/p}$$

$$(41)$$

其中, $p \ge 1$, 列向量x和q分别为:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{bmatrix}, \quad \mathbf{q} = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_D \end{bmatrix}$$
 (42)

q 常被称作查询点 (query point)。

如图 16 所示,(41) 相当于 D 维空间中,x 和 q 两点"距离"。距离 $|x-q|_p$ 的取值为 $[0,+\infty)$ 。 L^p 范数的 p 取不同值时,我们得到不同的距离度量。

白话说, L^p 范数这个数学工具把向量变成了非负标量,这个标量代表"距离"远近。

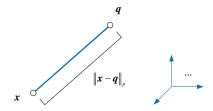


图 16. D维空间中 x 和 q 之间的"距离"

本系列丛书《数学要素》一册第 7 章给出表 1,表格总结常见距离度量的等距线。我们又在表中加入了不同距离度量的计算式。有了本章 L^p 范数这个数学工具,大家应该理解中欧氏距离、城市街区距离、切比雪夫距离、闵氏距离的背后的数学思想。本书第 20 章将简要介绍马氏距离,本系列丛书《概率统计》有一章专门讲解马氏距离及其应用。标准化欧式距离可以看成是特殊的马氏距离。



我们用 Streamlit 和 Plotly 制作了一个 App,计算并可视化平面上不同点距离鸢尾花数据质心的距离。App 包含表 1 中各种距离度量。请大家参考 Streamlit_Bk4_Ch3_03.py。请大家特别注意马氏距离的等高线,本书第 20 章将介绍马氏距离的原理。

表 1. 常见距离定义及等距线形状,来自《数学要素》

距离度量	定义	平面直角坐标系中等距线

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

欧氏距离 (Euclidean distance)	$\sqrt{\left(x-q\right)^{T}\left(x-q\right)}$	
标准化欧氏距离 (standardized Euclidean distance)	$\sqrt{(x-q)D^{-1}(x-q)^{\mathrm{T}}}$ D 为对角方阵,对角线上元素为每个特征的方差,即 $D=$ diag(diag(Σ))	
马氏距离 (Mahalanobis distance)	$\sqrt{\left(x-q ight)^{ extsf{T}} oldsymbol{arSigma}^{-1} \left(x-q ight)}$ $oldsymbol{arSigma}$ 为协方差矩阵	
城市街区距离 (city block distance)	$\ x-q\ _{_1}$	
切比雪夫距离 (Chebyshev distance)	$\ x-q\ _{\infty}$	
闵氏距离 (Minkowski distance)	$\ x-q\ _{_{p}}$	

高斯核函数: 从距离到亲近度

在很多应用场合,我们需要把"距离"转化为"亲近度",就好比上一章余弦距离和余弦相似度之间的关系。

为了把距离 $\|x-q\|_p$ 转化成亲近度,我们需要借助复合函数这个工具。本系列丛书《数学要素》一册介绍过**高斯函数** (Gaussian function)。二元高斯函数的基本形式为:

$$f(x_1, x_2) = \exp(-\gamma(x_1^2 + x_2^2))$$
 (43)

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

本书配套徽课视频均发布在 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 y 对二元高斯核函数形状影响。y 越大坡面越陡峭。

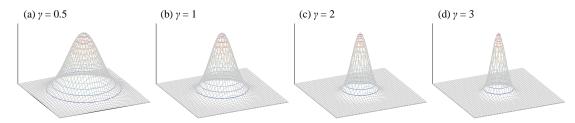


图 17. 高斯核曲面随 γ 变化

有了 L^2 范数,我们就可以定义机器学习中一个重要的函数——高斯核函数:

$$\kappa_{\text{RBF}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q}) = \exp(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_{2}^{2}) = \exp(-\gamma \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|^{2})$$
(44)

其中, $\gamma > 0$ 。

(44) 也可以写成:

$$\kappa_{\text{RBF}}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{q}) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|^2}{2\sigma^2}\right)$$
(45)

高斯核函数也叫**径向基核函数** (radial basis function kernel 或 RBF kernel)。不难发现,上式函数的取值范围为(0,1]。当x=q 时函数值为1,函数值无限接近0,却不能取到0。

(44) 中 $\|x-q\|_2^2$ 是 L^2 范数平方,即 x 和 q 两点欧几里得距离平方。径向基函数把代表距离的 $\|x-q\|_2^2$ 变成亲近度。也就是说,距离平方值 $\|x-q\|_2^2$ 越大,径向基函数越小,代表 x 和 q 越疏远。相反,距离平方值 $\|x-q\|_2^2$ 越小,径向基函数越大,代表 x 和 q 越靠近。

从 (x-q) 到 $||x-q||_2$ 、再到 $\exp(-\gamma ||x-q||_2^2)$ 是"向量 \to 距离 (标量) \to 亲近度 (标量)"的转化过程。大家将会在多元高斯分布概率密度函数中看到类似的转化。



本章从几何视角和大家聊了 L^p 范数,向量范数从不同角度度量了向量的"大小"。以下这四副图像总结本章的主要内容。 L^p 范数在本系列丛书的应用主要有两大方面:1) 距离度量;2) 正则化。请大家格外注意,只有 $p \ge 1$ 时,才叫范数。

此外,请大家注意本章内容和本系列丛书《数学要素》第7章的"等距线"和第9章的"超椭圆"这两个数学概念的联系。

本 PDF 文件为作者草稿,发布目的为方便大家在移动终端学习,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

矩阵也有范数, 这是本书第 18 章要讨论的话题之一。

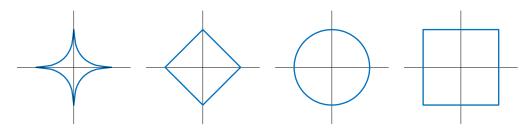


图 18. 总结本章重要内容的四副图,第一幅子图并非范数