

第三章 度量与投影

第 6 讲 内积与范数：数据度量的观点

黄定江

DaSE @ ECNU

djhuang@dase.ecnu.edu.cn

- ① 6.1 向量范数
- ② 6.2 内积、距离、夹角与正交性
- ③ 6.3 数据科学中常用的相似性度量 I
- ④ 6.4 矩阵的内积与范数
- ⑤ 6.5 范数在机器学习中的应用

1 6.1 向量范数

2 6.2 内积、距离、夹角与正交性

3 6.3 数据科学中常用的相似性度量 I

4 6.4 矩阵的内积与范数

5 6.5 范数在机器学习中的应用

内积和范数引例：文本聚类

在第 2.1.1 节中，我们对纽约时报在 2010 年 12 月 7 日的四则新闻提要都进行了向量化的表示，我们希望知道这四则新闻提要有哪些是相关的，可以通过对这四则新闻提要进行简单聚类来实现：

- (a) Suit Over Targeted Killing in Terror Case Is Dismissed ...
- (b) In Tax Deal With G.O.P, a Portent for the Next 2 Years ...
- (c) Obama Urges China to Check North Koreans ...
- (d) Top Test Scores From Shanghai Stun Educators ...

$$\text{sim}_{\cos}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|},$$

其中 \mathbf{x}, \mathbf{y} 是文本向量， $\text{sim}_{\cos}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ 表示 \mathbf{x}, \mathbf{y} 的余弦相似度。

内积和范数引例：手写数字分类



图 1: 对 MNIST 数据集进行分类 (绿色的为训练集, 蓝色的为测试集)

$$d(A, B) = \sum_{jk} |A_{jk} - T_{jk}|$$

其中 d 是手写数字训练图片的表示矩阵 A 和测试图片的表示矩阵 T 之间的距离 (两个矩阵同等大小), j, k 取遍矩阵所有元素。

6.1.1 向量范数：复数的模

例 1

复数 $x = (a, b) = a + ib$ 的长度或者模指的是

$$\|x\| = \sqrt{a^2 + b^2}$$

显然复向量 x 的模 $\|x\|$ 具有下列三条性质：

- (1) $\|x\| \geq 0$, 当且仅当 $x = 0$ 时等号成立；
- (2) $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$; ($\forall \lambda \in \mathbb{R}$)
- (3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$. ($x, y \in \mathbb{C}$)

向量的模

例 2

n 维向量 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ 的模或长度定义为

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$$

显然向量 x 的模 $\|x\|$ 也具有下列三条性质:

- (1) $\|x\| \geq 0$, 当且仅当 $x = 0$ 时等号成立;
- (2) $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|; (\forall \lambda \in \mathbb{R})$
- (3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|. (x, y \in \mathbb{R}^n)$

向量范数的定义

定义 1

设 \mathbb{V} 是数域上 \mathbb{K} 的 n 维线性空间, 函数

$$\begin{aligned}\|\cdot\| : \mathbb{V} &\rightarrow \mathbb{R}, \\ x &\mapsto \|x\|,\end{aligned}$$

它把向量 x 映射为它的长度 $\|x\| \in \mathbb{R}$, 并且使得对 $\forall \lambda \in \mathbb{R}$ 和 $\forall x, y \in \mathbb{V}$, 满足

(1) 非负性: $\|x\| \geq 0$, $\|x\| = 0$ 当且仅当 $x = 0$;

(2) 齐次性: $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$;

(3) 三角不等式: $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$;

称 $\|x\|$ 是向量 x 的向量范数, 称定义了范数的线性空间 \mathbb{V} 为赋范线性空间。

例 3

对任给的 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^T \in \mathbb{C}^3$, 试问如下实值函数是否构成向量范数?

1. $|x_1| + |2x_2 + x_3|$,
2. $|x_1| + |2x_2| - 5|x_3|$.

解

1. 非负性: $|x_1| + |2x_2 + x_3| \geq 0$;
齐次性: 令 $c \in \mathbb{C}$, $|cx_1| + |2cx_2 + cx_3| = |c|(|x_1| + |2x_2 + x_3|)$;
三角不等式: 令 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^T, \mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3)^T \in \mathbb{C}^3$, 则
 $|x_1 + y_1| + |2(x_2 + y_2) + (x_3 + y_3)| \leq |x_1| + |2x_2 + x_3| + |y_1| + |2y_2 + y_3|$.
2. 取 $\mathbf{x} = (0, 0, 1)$ 则 $|0| + |2 \times 0| - 5|1| = -5 < 0$ 不满足非负性。

6.1.2 几种常用的向量范数: l_p 范数

例 4

对于任意 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, 由

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}, 1 \leq p < \infty$$

定义的 $\|\cdot\|_p$ 是 \mathbb{R}^n 上的向量范数, 称为 p 范数或 l_p 范数。

(1) 当 $p = 1$ 时, 得到 1 范数或 l_1 范数, 也称为 Manhattan 范数

$$\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

(2) 当 $p = 2$ 时, 得到 2 范数或 l_2 范数, 也称为欧几里得范数

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

l_∞ 范数

在例4中, 在广义实数范围内, p 能否取到正无穷大呢? 具体而言, 如何计算这种范数呢?

例 5

对于任意 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, 由

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \|\mathbf{x}\|_p,$$

也就是,

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} |x_i|,$$

定义的 $\|\cdot\|_\infty$ 是 \mathbb{R}^n 上的向量范数, 称为 ∞ 范数或 l_∞ 范数。

l_∞ 范数

证明.

验证 $\|\mathbf{x}\|_\infty \equiv \max_i |\mathbf{x}_i|$ 是向量范数显然很容易。下证 $\max_i |\mathbf{x}_i| = \lim_{p \rightarrow +\infty} \|\mathbf{x}\|_p$ 。令 $\|\mathbf{x}_j\| = \max_j |\mathbf{x}_j|$ ，则有

$$\begin{aligned}\|\mathbf{x}\|_\infty = |\mathbf{x}_j| &\leq \left(\sum_{i=1}^n |\mathbf{x}_i|^p\right)^{(1/p)} = \|\mathbf{x}\|_p \\ &\leq (n|\mathbf{x}_j|^p)^{(1/p)} = n^{(1/p)} \|\mathbf{x}\|_\infty\end{aligned}$$

由极限的夹逼准则，并注意到 $\lim_{p \rightarrow +\infty} n^{1/p} = 1$ ，即得欲证结论。



非向量范数

例 6

当 $0 < p < 1$, 由

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

定义的 $\|\cdot\|_p$ 不是 \mathbb{R}^n 上的向量范数。

证明.

考虑 $n = 2, p = \frac{1}{2}$. 取 $\alpha = (1, 0)^T, \beta = (0, 1)^T$, 则

$$\|\alpha\|_{\frac{1}{2}} = \|\beta\|_{\frac{1}{2}} = 1, \|\alpha + \beta\|_{\frac{1}{2}} = 4$$

$$\|\alpha + \beta\|_{\frac{1}{2}} \geq \|\alpha\|_{\frac{1}{2}} + \|\beta\|_{\frac{1}{2}}$$



基数函数： l_0 范数

定义 2

向量 x 的基数函数定义为 x 中非零元素的个数，即

$$\text{card}(x) = \sum_{i=1}^n \mathcal{I}(x_i \neq 0)$$

其中，

$$\mathcal{I}(x_i \neq 0) = \begin{cases} 1 & , x_i \neq 0 \\ 0 & , x_i = 0 \end{cases}$$

基数函数也被称为 l_0 范数，但是它并不满足范数定义的条件。

例 7

求向量 $\boldsymbol{x} = (-1, 2, 4)^T$ 的 0, 1, 2, 和 ∞ -范数。

解

$$\|\boldsymbol{x}\|_0 = 3$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_1 = |-1| + 2 + 4 = 7$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{|-1|^2 + 2^2 + 4^2} = \sqrt{21}$$

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max\{|-1|, 2, 4\} = 4$$

6.1.3 范数的几何意义：单位范数球

定义 3

对于 l_p 范数小于等于 1 的向量集合,

$$\mathcal{B}_p = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : \|\boldsymbol{x}\|_p \leq 1\}$$

称为 l_p 的**单位范数球**。

范数的几何意义

例 8

单位范数球的形状反映了不同范数的性质，对于不同的 p ，范数球有着不同的几何形状。图2分别表示了 B_2, B_1, B_∞ 在 \mathbb{R}^2 的范数球形状。

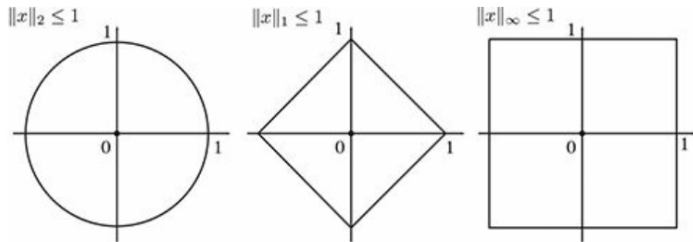


图 2: \mathbb{R}^2 上的范数球

6.1.4 范数性质

定义 4

设 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$ 为 \mathbb{R}^n 中一向量序列, $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^n$, 其中

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})^T, \boldsymbol{x}^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)^T$$

如果 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)} = x_i^* (i = 1, 2, \dots, n)$, 则称 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 收敛于向量 \boldsymbol{x}^* , 记作

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{x}^*$$

范数的连续性和收敛性质

定理 1

(范数的连续性) 设非负函数 $N(x) = \|x\|$ 为 \mathbb{R}^n 上任一向量范数, 则 $N(x)$ 是 x 分量 x_1, x_2, \dots, x_n 的连续函数。

定理 2

(柯西收敛原理) 实数域 \mathbb{R} (或者复数域 \mathbb{C}) 上的有限维线性空间按任何范数 $\|\cdot\|$ 必定完备。

定理 3

(向量序列收敛定理) 设 $\{x^{(k)}\}$ 为 \mathbb{R}^n 中一向量序列, $x^* \in \mathbb{R}^n$ 则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* \iff \lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(k)} - x^*\| = 0$$

其中 $\|\cdot\|$ 为向量的任一种范数。

范数的等价性

在 \mathbb{R}^n (或 \mathbb{C}^n) 上可以定义各种向量范数, 其数值大小一般不同, 但是在各种向量范数之间存在下述重要的关系

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}\|_{\infty} &\leq \|\boldsymbol{x}\|_1 \leq n\|\boldsymbol{x}\|_{\infty} \\ \frac{1}{\sqrt{n}}\|\boldsymbol{x}\|_1 &\leq \|\boldsymbol{x}\|_2 \leq \|\boldsymbol{x}\|_1 \\ \frac{1}{\sqrt{n}}\|\boldsymbol{x}\|_2 &\leq \|\boldsymbol{x}\|_{\infty} \leq \|\boldsymbol{x}\|_2\end{aligned}$$

或者

$$\|\boldsymbol{x}\|_{\infty} \leq \|\boldsymbol{x}\|_2 \leq \|\boldsymbol{x}\|_1 \leq \sqrt{n}\|\boldsymbol{x}\|_2 \leq n\|\boldsymbol{x}\|_{\infty}$$

范数的等价性

定理 4

(向量范数的等价性定理) 设 $\|x\|_s, \|x\|_t$ 为 \mathbb{R}^n 上的任意两种向量范数, 则存在两个与向量无关的正常数 $c_1, c_2 > 0$, 使得下面的不等式成立

$$c_1 \|x\|_s \leq \|x\|_t \leq c_2 \|x\|_s, \quad \text{对一切 } x \in \mathbb{R}^n$$

并称 $\|x\|_t$ 和 $\|x\|_s$ 为 \mathbb{R}^n 上的等价范数。