05 | 线性空间：如何通过向量的结构化空间在机器学习中做降维处理？

2020-08-07 朱维刚

重学线性代数 进入课程 >

讲述：朱维刚
时长 15:01 大小 13.77M

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

今天我们来聊一聊“线性空间”。在“基本概念”那一节课中，我讲到了向量，你也看到了，线性方程组是能够通过矩阵或向量来表达的。那为什么我们还要学习线性空间呢？

说到线性空间，其实你可以通过“空间”这个词把线性空间和我们的生活做个类比。就像我们生活在三维世界中，在这个空间中，一切物质都是运动的，而运动也是有一定规律的。这么来看的话，空间其实就是一个具有实际意义的集合，其中包含了**对象**和**运动**。

把这个理解平移到线性空间也是一样的，向量就是对象，如果把**向量**看成是**线性空间中的点**，那**向量的变换**就是**点在空间中的运动**。所以，线性空间也是一个集合，它的意义在

于，赋予了向量生命和活力，只有掌握了线性空间，我们才能真正在实际运用中有的放矢。因为所有的活动都要在这个空间中发生，比如：线性空间中用到的傅立叶变换。

组

还是老样子，我们要先从学习线性空间会用到的基础知识开始讲起。

我们先来讲一下“组”，看一看组有什么性质。说到“组”，它其实是一个通用的概念，和线性空间没有什么关系，但我之所以要先说组，是因为组和空间是类似的，也是集合，性质也差不多，如果你了解了组，就更容易理解线性空间了。而且，组在计算机科学中是得到了广泛应用的，特别是在计算机密码学和图形图像处理中。

说了这么多，“组”到底是什么呢？组，其实就是包含一系列元素的集合，在对这些集合元素实施某类运算后，这个集合仍然保持着封闭性。可能这么说你会有些疑惑，我还是通过数学方法来定义组，可能会让你的思路更加清晰一些。

我们先来定义一个集合 G 和集合上的某一类运算，比如：乘 $\otimes$，使得 $G \otimes G$ 的结果还是属于 G，如果我们要 $G:=(G, \otimes)$ 是一个组，则需要满足以下这些条件：

1.G 在 $\otimes$ 运算中是封闭的，也就是：$\forall x, y \in G: x \otimes y \in G$。

2. 满足结合律，也就是：$\forall x, y, z \in G:(x \otimes y) \otimes z=x \otimes(y \otimes z)$。

3. 恒等元素（或者叫做中性元素）e，满足：$\exists \mathrm{e} \in G, \forall x \in G: x \otimes e=x, e \otimes x=x$，这里的恒等元素 e 在一般数字中你可以认为是 1，而在矩阵中就可以认为是单位矩阵。

4. 有 x 的逆元素 y，使得：$\forall \mathrm{e} \in G, \exists x \in G: x \otimes y=e, y \otimes x=e$，其中 e 是恒等元素。

再补充一点，如果满足 $\forall x, y \in G: x \otimes y \in y \otimes x$，则 $G:=(G, \otimes)$ 就叫作交换组。

现在我们来做个测试，看看你是否理解了组的定义。

一个 $n \times n$ 的实数矩阵 A 和它的乘法运算是一个组吗？通过符号表达就是：$\left(A^{n \times n}, \quad \cdot\right)$。

想要知道这个问题的答案，我们就需要用前面满足组的这几个条件来分析一下。

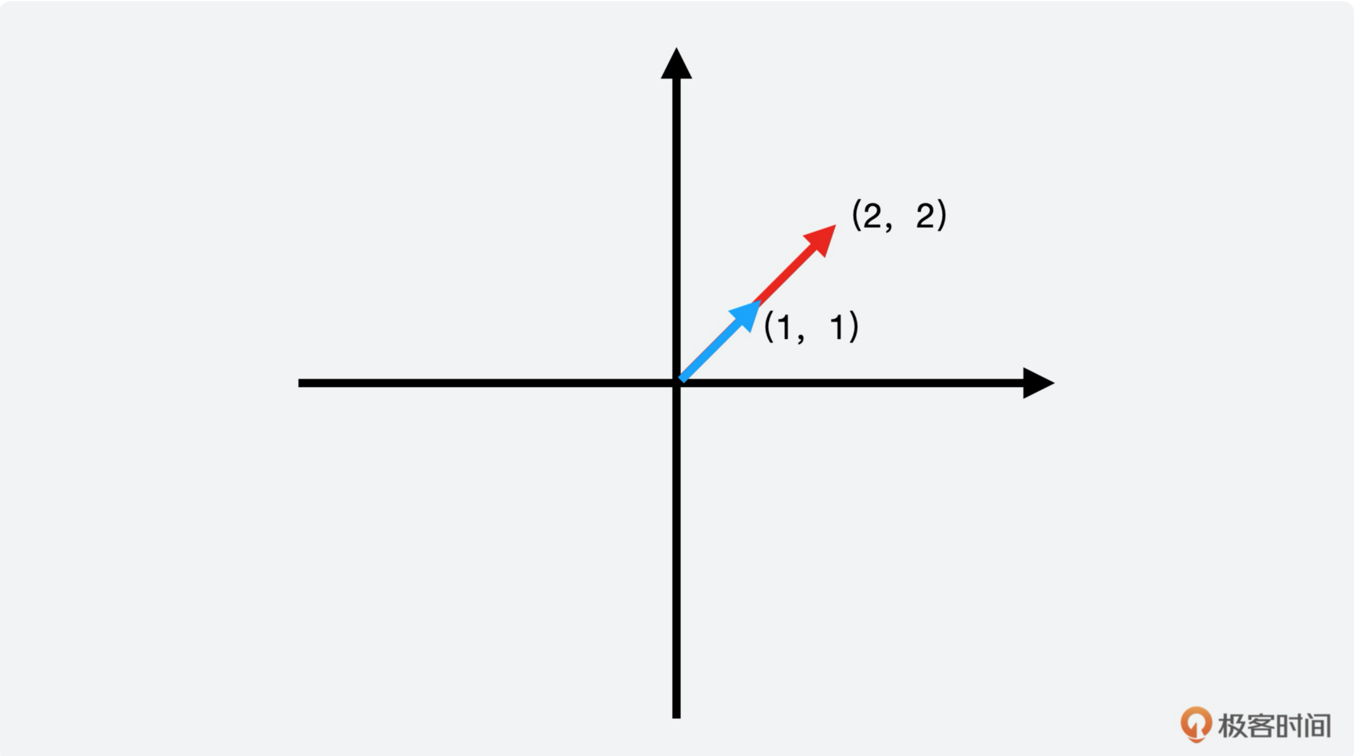
首先，是封闭性和结合律，从矩阵乘的定义就能直接看出来，它们是满足的；其次，我们来看恒等元素，单位矩阵就是矩阵元素，也满足组条件；最后，我们看看逆元素，假设 A 矩阵的逆矩阵 A^{-1} 存在，那很明显，满足 $AA^{-1}=I$，这里 I 就是恒等元素。

于是，我们可以说 $(A^{n\times n},\quad\cdot)$ 是一个组，而矩阵乘不符合交换律，所以这个组并不是交换组。

向量空间

如果我们在“组”的基础上再扩展一下，就能够很顺利地来到“线性空间”。说起线性空间，它也叫作向量空间，它在一些书本和网络上的解释都是比较晦涩难懂的，但如果我们在“组”的基础上来解释它，你应该会比较容易理解了。

刚才我们说的组只包含了某一类运算，这类运算是在集合元素上的内部运算，我们把它定义为加 （$+$） 运算，现在再引入一类外部运算，标量乘 （$\cdot$）。于是，你可以想象一下，我们可以把内部运算看成是加法，把外部运算看成是“缩放”，因为标量乘就是一个标量和向量相乘。如果从二维坐标系的角度来看一下，点 $(1,1)$ 和标量 2 相乘就是 $(2,2)$，这个就是放大效果。



在通过“组”来认识向量空间后，再从数学角度去看向量空间的定义，你应该就能完全理解了。

一个实数向量空间 V 是一个集合，它包含了两类运算，一类是加，一类是标量乘，而且运算都满足 V 的封闭性，也就是说，V 中元素的运算结果还是属于 V。

$$
\begin{aligned}
&+: V+V \rightarrow V \\
&\cdot: \lambda \cdot V \rightarrow V
\end{aligned}
$$

这个向量空间可以表示成 $V:=(V,+,\cdot)$，其中：

1. 向量空间 V 的 $(V,+)$ 是一个交换组。

2.V 满足分配律：$\forall \lambda \in R, x, y \in V: \lambda \cdot (x+y)=\lambda \cdot x+\lambda \cdot y$；以及 $\forall \lambda, \varphi \in R, x \in V: (\lambda+\varphi) \cdot x=\lambda \cdot x+\varphi \cdot x$。

3.V 外部运算满足结合律：$\forall \lambda, \varphi \in R, x \in V: \lambda \cdot (\varphi \cdot x)=(\lambda \cdot \varphi) \cdot x$。

4.V 外部运算的恒等元素满足：$\forall x \in V: 1 \cdot x=x$。

在向量空间 V 中的元素 x 是向量，向量空间加运算 $(V,+)$ 的恒等元素是零向量 $0=\begin{bmatrix} 0, & \ldots & ,0 \end{bmatrix}^{T}$。这里的加运算是内部运算，也叫做向量加，元素 λ 属于实数，叫做标量，外部运算乘 $\cdot$ 是标量乘。

好了，我给出了向量空间的一般描述和数学定义，如果你还是有一些不理解，也没有关系，我再举两个例子来加深你对向量空间的理解。

例 1：进一步理解向量加和标量乘

对于向量空间的向量加和标量乘：我们定义一个实数向量空间 R^{n}，n 表示向量元素：

> “加”定义为向量之间的加：$x+y=(x_{1}, \ldots, x_{n})+(y_{1}, \ldots, y_{n})=(x_{1}+y_{1}, \ldots, x_{n}+y_{n})$。 加的结果还是属于向量空间 R^{n}。
>
> 标量乘就是向量乘标量：$\lambda x=\lambda(x_{1}, \ldots, x_{n})=(\lambda x_{1}, \ldots, \lambda x_{n})$。

标量乘的结果还是属于向量空间 R^n。

例 2：进一步理解矩阵加和标量乘

对于向量空间的矩阵加和标量乘：我们定义一个实数向量空间 $R^{m\times n}$，用 $m\times n$ 表示 m 行 n 列矩阵元素：

我们把“加”定义为矩阵之间的加。加的结果还是属于向量空间 $R^{m\times n}$。

$$A+B=\begin{bmatrix} a_{11}+b_{11} & \dots & a_{1n}+b_{1n} \\ . & & . \\ . & & . \\ . & & . \\ a_{m1}+b_{m1} & \dots & a_{mn}+b_{mn} \end{bmatrix}$$

而标量乘就是矩阵乘标量。标量乘的结果还是属于向量空间 $R^{m\times n}$。

$$\lambda A=\begin{bmatrix} \lambda a_{11} & \dots & \lambda a_{1n} \\ . & & . \\ . & & . \\ \lambda_{m1} & \dots & \lambda \dot{a}_{mn} \end{bmatrix}$$

到这里，相信你应该了解了向量空间的基本概念，接下来这一讲的重头戏就要来了，它就是向量子空间。

向量子空间

为什么说向量子空间是重头戏？那是因为它在机器学习中的地位相当重要，被用在了**降维算法**中。这里我会分两步来讲解，先讲向量子空间的基本概念，再通过一个机器学习的例子，能让你更了解它，并灵活运用在工作实践中。

什么是向量子空间？

从“子”这个字，我们可以很直观地想到，它是被包含在向量空间中的，事实也确实如此。

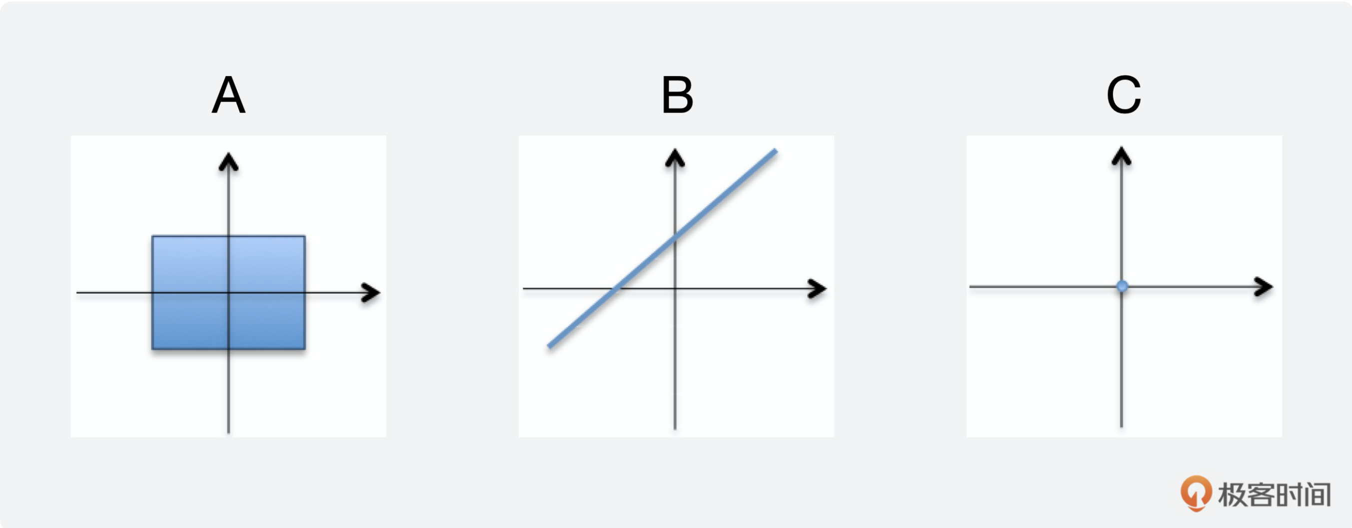
已知 $V := (V, +, \cdot)$ 是一个向量空间，如果 $U \subseteq V, U \neq 0$，那么 $U := (U, +, \cdot)$ 就是 V 的向量子空间，或者叫做线性子空间。向量子空间 U 自然继承 V 的许多属性，其中包括：交换组的属性、分配律、结合律和中性元素。除此以外，要判断 U 是不是向量子空间，我们还需要这两个条件：

1.$U \neq 0$，但 $0 \in U$。

2. U 的封闭性满足外部运算：$\forall \lambda \in R, \forall x \in U : \lambda x \in U$，同时满足内部运算：$\forall x, y \in U : x + y \in U$。

介绍完向量子空间基本概念后，我们一起来通过一个例子来巩固一下所学的知识，看看你是否已经掌握了向量子空间。

请你观察下面列举的 A、B、C 三张图像，里面有 R^2 的向量子空间吗？



这里我不会给出答案，你可以自己思考一下，友情提醒：A、B、C 中只有一个是向量子空间。

机器学习中的向量子空间

结合实践来看向量子空间的时候到了。在机器学习中，直接计算高维数据困难重重，一方面是数据处理和分析困难，使得数据可视化几乎不可能；另一方面是因为数据存储量太大，计算要付出的代价太高。

所以，我们要从向量空间中去除冗余数据，形成向量子空间。这样数据存储量就被极大地压缩了，处理和分析数据也简单了很多。因为高维数据中其实有很多维是冗余的，它们可以被其它维组合表示，也就是“降维”。

降维就是利用结构化和相关性，在尽量保证信息不损失的情况下，转换数据表现形式，让数据更“紧凑”。换句话说，你可以把降维看成是数据压缩技术，类似图像的 jpeg 和音频的 MP3 压缩算法。或者简单地说，降维就是将数据投射到一个低维子空间，比如：三维数据集可以降成二维，也就是把数据映射到平面上。

机器学习中运用最多的降维算法就是主成分分析，简称 PCA（Principal Component Analysis），也叫做卡尔胡宁 - 勒夫变换（Karhunen-Loeve Transform）。它是一种用于探索高维数据结构的技术，已经存在超过 100 年了，但至今仍然广泛被使用在数据压缩和可视化中。

我们来看一个例子：假设你负责的是机器学习算法，而你的应用场景是车辆的牌照识别，也就是 OCR（Optical Character Recognition）光学字符识别。在这个场景中，大街上的摄像头必须实时捕捉运动车辆的牌照，一旦发现问题车辆就需要快速识别牌照，并移交交警监管部门来做进一步处理。你会怎么处理呢？

牌照被拍下后就是图片，为了减小图像原始数据量，减少后续处理时的计算量，这些图片首先需要进行经过灰度处理（牌照只需要数字，不需要对彩色图像的 RGB 三个分量都进行处理），处理后就会变成类似这样的形式：

假定每个数字是一个 $28*28$ 尺寸的灰度图片，包含 784 个像素，那每张灰度数字图片就是一个向量，这个向量就有 784 个维度，可以表示成 $x \in R^{784}$，而你的样本库少说也有几十万个样本数据，如果按一般的方法是不可能做到实时识别的。所以，这样的场景就需要使用 PCA 来压缩数据，进行大幅度降维。

这里我们简单一些，从二维的角度来看看 PCA。在 PCA 中，最关键的就是寻找数据点 x_n 的相似低维投影 y_n，而 y_n 就是子向量空间。

考虑 R^2 和它的两个基，$e_1=[1,0]^T$、$e_2=[0,1]^T$，$x \in R^2$ 能够表示成这两个基的线性组合（“基”会在第 7 节课中详细介绍）。

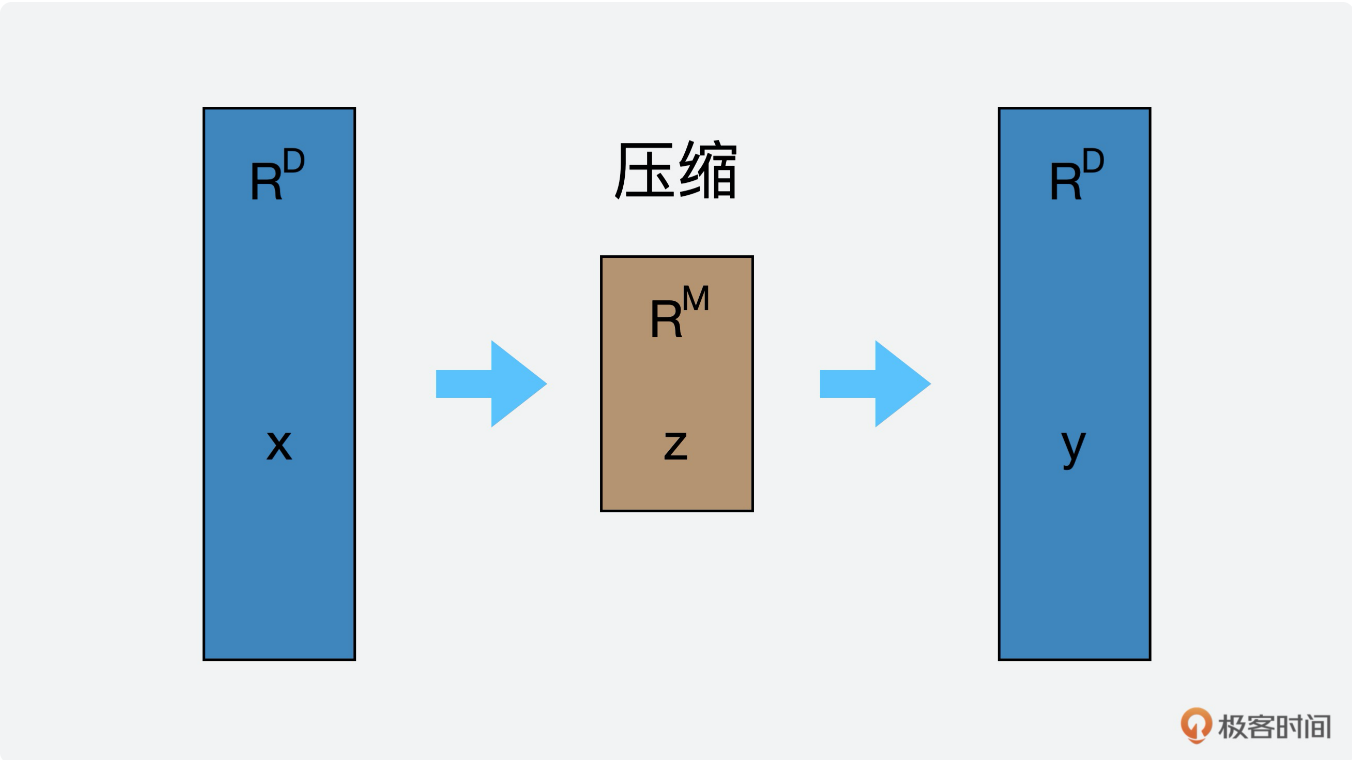
$$\begin{bmatrix} 5 \\ 3 \end{bmatrix} = 5e_1 + 3e_2$$

于是，相似低维投影 y_n 就可以表示成下面这种形式。

$$y_n = \begin{bmatrix} 0 \\ z \end{bmatrix} \in R^2, z \in R$$

同时，y_n 也可以写成这样的形式：$y_n = 0e_1 + ze_2$。

这里的 z 就是我们要找的值，而 y_n 就是一个向量子空间 U，它的维度是一维。最后，我们再通过下图来更直观地说明一下 PCA 的过程。



图的左边是原始向量空间 x，经过压缩后，我们找到了子向量空间 z，z 经过重构后，形成了最终的向量空间 y，y 还是属于原来的向量空间，但 y 却拥有比 x 更低的维度表现。

从数学的角度看，我们其实就是在寻找 x 和 z 之间的线性关系，使得 $z = B^T x$，以及 $y = Bz$，其中 B 是矩阵。如果我们从数据压缩技术方向来看就更容易理解了，图中的左边箭头是编码过程，也就是压缩，右边的箭头是解码过程，也就是映射，而矩阵 B 就是把属于 R^M 向量空间的低维的 z，映射回原来的向量空间 R^D。同理，矩阵 B^T 就是把属于原来 R^D 向量空间的高维 x 压缩成低维的 z。

本节小结

好了，到这里线性空间这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

今天的知识很重要，实践中都是围绕向量空间展开的，也就是说向量空间是实践的基本单位，你也一定要掌握子向量空间，因为现实中数据都是高维度的，从向量空间降维后找到子向量空间，这样就能大大提高数据运算和分析的效率。

再次特别提醒：这一讲非常重要，因为后面几讲都是围绕向量空间展开的，如果你哪里没看懂，一定要多看几次，确保完全明白了。有任何问题，你也可以随时在留言区向我提问。

线性代数练习场

之前我讲了一个现实的向量空间降维场景：车辆的牌照识别，这里，我们通过另一个现实场景，来练习一下向量空间降维的思维。

目前市场上语音识别的应用有很多，比如：天猫精灵、苹果 Siri、小爱等等，而语音识别涉及的技术有很多，有语言建模、声学建模、语音信号处理等等。在语音信号处理中，语音声波通过空气传播，并被麦克风捕获，麦克风将压力波转换为可捕获的电活动。我们对电活动进行采样，用以创建描述信号的一系列波形采样。

采样是数据收集的过程，数据收集后需要做数据预处理，而预处理的关键一步就是特征提取，现在请你从“特征提取”的方向上思考下，有哪些和目前所学到的数学知识有关？

> 友情提醒：特征提取就是数字化过程，也是向量化后形成向量空间的过程。

欢迎在留言区写出你的思考，我会及时回复。如果有收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

提建议

上一篇 04 | 解线性方程组：为什么用矩阵求解的效率这么高？

下一篇 06 | 线性无关：如何理解向量在N维空间的几何意义？

精选留言 (8)

写留言

那时刻
2020-08-07

关于思考题

1. R2 的向量子空间，我的理解是图像A
2. 我理解的特征提取包含有降维操作，假设采样数据是n维数据 Rn，特征提取可以认为是寻找Rn的向量子空间，然后把采样数据映射到该向量子空间，达到特征提取的目的。...

展开

作者回复: 你好，那时刻，这个厉害了，采样后就是通过图像来看这个问题的，最后其实就是分析图像，降维也是图像处理，包括降噪处理。啊呀，这么说我是不是提前透露思考了。

1

那时刻
2020-08-07

有两个问题请教下老师：
1. 向量空间提到了分配律，而组的定义没有，这是他们的区别吗？
2. 交换组的概念不是很清楚，它的意义是什么？

作者回复: 1. 是的，因为向量空间包含了两类运算，一类是加，一类是标量乘。
2. 交换组从组本身来说没有特别的含义，只是一个定义而已，它的意义其实就是引出向量空间，所以向量空间定义的第一条就是(V,+)是一个交换组。

1

Paul Shan
2020-08-11

思考题
1. C，A没有包含0向量，非0元素一旦收缩到0就不再封闭。B也包含非零元素，却不是无限的，非零元素放大一定程度也不再封闭。
2.声音信号的采集就包含了很多维度的信息，这些维度的信息很可能有冗余，可以用线性子空间减少维度，起到数据压缩的效果。
展开

作者回复: 厉害，Paul，其实冗余信息有双面性，一方面可以用来压缩，另一方面还能用在数据恢复上，就看怎么用了。

三件事
2020-08-10

子空间应该是图C。A不满足封闭性，B没过原点。
展开

Paul Shan
2020-08-10

请问老师，向量子空间为什么要把单独0向量构成的集合排除出去？

作者回复: Hi Paul，0向量没有被排除出去，子空间不等于0，但包含0。但如果从单独0向量来说，为什么子空间不等于0？除了它本身的性质决定外，我们从另一个角度，也就是实际角度看，如果子空间只有0，那和什么都没有一样，研究子空间也失去了意义。

Iridescent
2020-08-08

请问老师，为什么yn可以直接写成0和z的形式？，e1前的系数为什么直接等于0？

作者回复: 你好，Iridescent，因为从降维的角度来说，写成0就类似数据压缩效果，z假定是执行压缩后的结果数据，yn可以表示成0和z组合，它也可以由基来表达，一个是0和基e1乘，一个是z

和基e2乘。

qinsi

2020-08-08

根据“组”的定义，这个概念在国内一般翻译成“群”...

作者回复: 这个我纠结了好久，其实“群”是有问题的，因为“物以类聚，人以群分”，而且组确实在计算机科学中用到的也比较多。

Litt1eQ

2020-08-07

老师您好，我有一个疑问，对于组的第四点定义 有 x 的逆元素 y 这个是针对 所有组元素都要满足还是说只要存在就可以，如果存在即可的话单位元是一定有逆元的（逆元即他自己）如果对所有元素都要满足的话 实数域R上的n维矩阵对于乘法运算来说应该是不构成一个组的，实数域上n维所有的可逆元素作为组的集合，乘法作为运算这样应该是一个组。

展开

作者回复: 你好，Litt1eQ，谢谢你的提问，应该是存在x，音频可能有误，我改一下。