# ベクトルの内積とその応用

戸瀬　信之

ITOSE PROJECT

MSF2019，Lec 04, 2019 年 04 月 30 日（平成最後の講義），
V02 2020/03, V04 2021/05

# 列ベクトル

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^n \tag{1}$$

$\lambda \in \mathbf{R}$ に対して

$$\vec{x} + \vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 + y_1 \\ x_2 + y_2 \\ \vdots \\ x_n + y_n \end{pmatrix}, \ \vec{x} - \vec{y} = \begin{pmatrix} x_1 - y_1 \\ x_2 - y_2 \\ \vdots \\ x_n - y_n \end{pmatrix}, \ \lambda\vec{x} = \begin{pmatrix} \lambda x_1 \\ \lambda x_2 \\ \vdots \\ \lambda x_n \end{pmatrix}$$

# 行ベクトル

$n$ 次元行ベクトル

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix}$$

（転置）

$${}^t\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad {}^t\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots x_n \end{pmatrix}$$

# 列ベクトルと行ベクトルの積

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}\vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n$$

後に $1 \times n$ 行列と $n \times 1$ 行列の積となる。

# ベクトルの内積

$\vec{x}, \vec{y} \in \mathbf{R}^n$ に対して

$$(\vec{x}, \vec{y}) = \vec{x} \cdot \vec{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n$$

統計学に関連することを勉強するときは公式

$${}^t\vec{x}\vec{y} = (x_1 \;\; x_2 \;\; \cdots x_n) \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = (\vec{x}, \vec{y})$$

が有用である。

# ベクトルのノルム

$\vec{x} \in \mathbf{R}^n$ に対して

$$||\vec{x}||^2 = (\vec{x}, \vec{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \tag{2}$$

$$||\vec{x}|| \geq 0$$

$$||\vec{x}|| = 0 \ \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0}$$

# 内積の基本公式

$\vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in \mathbf{R}^n$ と $\lambda \in \mathbf{R}$ に対して

$$(\vec{x} + \vec{y}, \vec{z}) = (\vec{x}, \vec{z}) + (\vec{y}, \vec{z}) \tag{3}$$

$$(\vec{x}, \vec{y} + \vec{z}) = (\vec{x}, \vec{y}) + (\vec{x}, \vec{z}) \tag{4}$$

$$(\lambda\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{x}, \lambda\vec{y}) = \lambda(\vec{x}, \vec{y}) \tag{5}$$

$$(\vec{x}, \vec{y}) = (\vec{y}, \vec{x}) \tag{6}$$

# 内積の有用な公式

$$||\vec{x} \pm \vec{y}||^2 = ||\vec{x}||^2 \pm 2(\vec{x}, \vec{y}) + ||\vec{y}||^2$$

**(証明)**

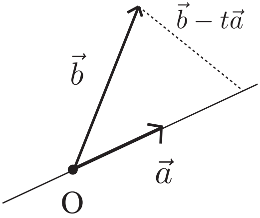
$$\begin{aligned}
||\vec{x} + \vec{y}||^2 &= (\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y}) \quad ((2)\,\text{から}) \\
&= (\vec{x}, \vec{x} + \vec{y}) + (\vec{y}, \vec{x} + \vec{y}) \quad ((3)\,\text{から}) \\
&= (\vec{x}, \vec{x}) + (\vec{x}, \vec{y}) + (\vec{y}, \vec{x}) + (\vec{y}, \vec{y}) \quad ((4)\,\text{から}) \\
&= (\vec{x}, \vec{x}) + (\vec{x}, \vec{y}) + (\vec{x}, \vec{y}) + (\vec{y}, \vec{y}) \quad ((5)\,\text{から}) \\
&= ||\vec{x}||^2 + 2(\vec{x}, \vec{y}) + ||\vec{y}||^2 \quad ((6)\,\text{から})
\end{aligned}$$

# 問題

$\vec{a} \neq \vec{0}$ であるとき

$$||\vec{b} - t\vec{a}||^2$$

を最小にする $t \in \mathbf{R}$ を求める。




$$\begin{aligned} ||\vec{b} - t\vec{a}||^2 &= ||\vec{b}||^2 - 2t(\vec{a}, \vec{b}) + t^2||\vec{a}||^2 \\ &= ||\vec{a}||^2 \left( t - \frac{(\vec{a}, \vec{b})}{||\vec{a}||^2} \right)^2 + ||\vec{b}||^2 - \frac{(\vec{a}, \vec{b})^2}{||\vec{a}||^2} \end{aligned}$$

# 解答

$$t = t_0 = \frac{(\vec{a}, \vec{b})}{||\vec{a}||^2}$$

$\vec{w} = t_0\vec{a} = \frac{(\vec{a},\vec{b})}{||\vec{a}||^2}\vec{a}$ は $\vec{b}$ の $\vec{a}$ 方向の正射影

$$\begin{aligned}(\vec{b} - t_0\vec{a}, \vec{a}) &= (\vec{b}, \vec{a}) - t_0(\vec{a}, \vec{a}) \\ &= (\vec{b}, \vec{a}) - \frac{(\vec{a}, \vec{b})}{||\vec{a}||^2} \cdot ||\vec{a}||^2 = 0\end{aligned}$$

$(\vec{b} - t_0\vec{a}) \perp \vec{a}$

# データ解析と列ベクトル

2 変量のデータを考えます。

$$\vec{x} = \frac{1}{\sqrt{n}}\begin{pmatrix} x_1 - \bar{x} \\ x_2 - \bar{x} \\ \vdots \\ x_n - \bar{x} \end{pmatrix}, \vec{y} = \frac{1}{\sqrt{n}}\begin{pmatrix} y_1 - \bar{y} \\ y_2 - \bar{y} \\ \vdots \\ y_n - \bar{y} \end{pmatrix}$$

| | |
|---|---|
| $x_1$ | $y_1$ |
| $x_2$ | $y_2$ |
| $\vdots$ | $\vdots$ |
| $x_n$ | $y_n$ |

**分散・共分散**

$$||\vec{x}||^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = V(x) \quad (x \text{ の分散})$$

$$(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = C_{xy} \quad (x \text{ と } y \text{ の共分散})$$

# データ解析と列ベクトル（その２）

新たな変量 $z = ax + by$ ($a, b$ は定数)

$$z_i = ax_i + by_i \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

このとき $\bar{z} = a\bar{x} + b\bar{y}$

$$\begin{aligned}\vec{z} &= \frac{1}{\sqrt{n}}((ax_i + by_i) - (a\bar{x} + b\bar{y})) \\ &= a\left(\frac{x_i - \bar{x}}{\sqrt{n}}\right) + b\left(\frac{y_i - \bar{y}}{\sqrt{n}}\right) = a\vec{x} + b\vec{y}\end{aligned}$$

$z$ の分散は

$$\begin{aligned}V(z) &= ||\vec{z}||^2 = ||a\vec{x} + b\vec{y}||^2 \\ &= a^2||\vec{x}||^2 + 2ab(\vec{x}, \vec{y}) + b^2||\vec{y}||^2 \\ &= a^2V(x) + 2abC_{xy} + b^2V(y)\end{aligned}$$

# Cauchy-Schwartz の不等式

**定理**　$\vec{x},\ \vec{y} \in \mathbf{R}^n$ とすると

$$|(\vec{x}, \vec{y})| \leq ||\vec{x}|| \cdot ||\vec{y}||$$

**証明**　すべての $t \in \mathbf{R}$ に対して

$$0 \quad \leq \quad ||t\vec{x} - \vec{y}||^2 = t^2||\vec{x}||^2 - 2t(\vec{x}, \vec{y}) + ||\vec{y}||^2$$

$\vec{x} = \vec{0}$ のとき「不等式」は明らかに成立。
$\vec{x} \neq \vec{0}$ のとき、従って $||\vec{x}|| > 0$ のとき

$$(\vec{x}, \vec{y})^2 - ||\vec{x}||^2 \cdot ||\vec{y}||^2 \leq 0$$

**注意**　$A > 0$ のとき、

$$At^2 + 2Bt + C \geq 0 \quad (t \in \mathbf{R}) \Leftrightarrow B^2 - AC \leq 0$$

# Cauchy-Schwartz の不等式の応用

相関係数

$$\rho_{xy} = \frac{C_{xy}}{\sqrt{V(x)}\sqrt{V(y)}} = \frac{(\vec{x}, \vec{y})}{||\vec{x}|| \cdot ||\vec{y}||}$$

**定理**

$$-1 \leq \rho_{xy} \leq 1$$

**注意**　$|\rho_{xy}| \to 1$ のとき、$x - y$ 平面上、データはより直線に近く分布する。（これについては次回）

# 問題 II

$\vec{a}, \vec{b} \in \mathbf{R}^n$ が

$$\vec{a} \not\parallel \vec{b}$$

を満たすときに, $\vec{c} \in \mathbf{R}^n$ に対して

$$||\vec{c} - x\vec{a} - y\vec{b}||^2$$

を最小化する $x, y \in \mathbf{R}$ を求める.

# まず $\vec{a} \perp \vec{b}$ のとき

$\vec{a} \perp \vec{b}$ の場合を考える.

$$
\begin{aligned}
||\vec{c} - x\vec{a} - y\vec{b}||^2 &= ||\vec{c}||^2 - 2(\vec{c}, x\vec{a} + y\vec{b}) + ||x\vec{a} + y\vec{b}||^2 \\
&= x^2||\vec{a}||^2 + y^2||\vec{b}||^2 - 2x(\vec{c}, \vec{a}) - 2y(\vec{c}, \vec{b}) + ||\vec{c}||^2 \\
&= ||\vec{a}||^2 \left( x - \frac{(\vec{c}, \vec{a})}{||\vec{a}||^2} \right)^2 + ||\vec{b}||^2 \left( y - \frac{(\vec{c}, \vec{b})}{||\vec{b}||^2} \right)^2 \\
&\qquad + ||\vec{c}||^2 - \frac{(\vec{c}, \vec{a})^2}{||\vec{a}||^2} - \frac{(\vec{c}, \vec{b})^2}{||\vec{b}||^2}
\end{aligned}
$$

から

$$
x = \frac{(\vec{c}, \vec{a})}{||\vec{a}||^2}, \quad y = \frac{(\vec{c}, \vec{b})}{||\vec{b}||^2}
$$

のとき最小となる。この意味は？

# グラム・シュミットの直交化—例

$\vec{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\vec{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ に対して $\vec{b}$ の $\vec{a}$ 方向の直交射影は

$$\vec{w} = \frac{(\vec{b}, \vec{a})}{||\vec{a}||^2}\vec{a} = \frac{1}{3}\vec{a}$$

$$\vec{b} - \vec{w} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ -1 \end{pmatrix}$$

ここで

$$\vec{p} = \frac{1}{||\vec{a}||}\vec{a} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{q} = \frac{1}{||\vec{b} - \vec{w}||}(\vec{b} - \vec{w}) = \frac{1}{\sqrt{42}}\begin{pmatrix} 5 \\ -4 \\ -1 \end{pmatrix}$$

は $||\vec{p}|| = ||\vec{q}|| = 1$, $(\vec{p}, \vec{q}) = 0$ を満たし

$$L := \{x\vec{a} + y\vec{b};\ x, y \in \mathbf{R}\}$$

の**正規直交基底**と呼びます.

# グラム・シュミットの直交化—例

$$(\vec{p}\ \vec{q}) = \begin{pmatrix}\vec{a} & \vec{b}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{||\vec{a}||} & -\frac{(\vec{a},\vec{b})}{||\vec{b}-\vec{w}||\cdot||\vec{a}||^2} \\ 0 & \frac{1}{||\vec{b}-\vec{w}||}\end{pmatrix}$$

から

$$x\vec{a}+y\vec{b}=\xi\vec{p}+\eta\vec{q} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{||\vec{a}||} & -\frac{(\vec{a},\vec{b})}{||\vec{b}-\vec{w}||\cdot||\vec{a}||^2} \\ 0 & \frac{1}{||\vec{b}-\vec{w}||}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}$$

となりますから

$$L=\{\xi\vec{p}+\eta\vec{q};\ \xi,\eta\in\mathbf{R}\}$$

であることが分かります.

# グラム・シュミットの直交化—例

このとき $\vec{c} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ のとき

$$||\vec{c} - \xi\vec{p} - \eta\vec{q}||^2 = (\xi - (\vec{c}, \vec{p}))^2 + (\eta - (\vec{c}, \vec{q}))^2 + ||\vec{c}||^2 - (\vec{c}, \vec{p})^2 - (\vec{c}, \vec{q})^2$$

から最小になるのは

$$\xi = (\vec{c}, \vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \eta = (\vec{c}, \vec{q}) = \frac{5}{\sqrt{42}}$$

であることが分かります.

**問** 以上の計算から $||\vec{c} - x\vec{a} - y\vec{b}||^2$ を最小化する $x, y \in \mathbf{R}$ を求めましょう.

# グラム・シュミットの直交化—例

$\vec{w}_0 = (\vec{c}, \vec{p})\vec{p} + (\vec{c}, \vec{q})\vec{q}$ と定めると

$$\begin{aligned}(\vec{c} - \vec{w}_0, \vec{p}) &= (\vec{c}, \vec{p}) - (\vec{c}, \vec{p})||\vec{p}||^2 - (\vec{c}, \vec{q})(\vec{q}, \vec{p}) \\ &= (\vec{c}, \vec{p}) - (\vec{c}, \vec{p}) = 0 \\ (\vec{c} - \vec{w}_0, \vec{q}) &= (\vec{c}, \vec{q}) - (\vec{c}, \vec{p})(\vec{p}, \vec{q}) - (\vec{c}, \vec{q})||\vec{q}||^2 \\ &= (\vec{c}, \vec{q}) - (\vec{c}, \vec{q}) = 0\end{aligned}$$

から

$$\vec{c} - \vec{w}_0 \perp L$$

が分かります．$\vec{w}_0$ を $\vec{c}$ の $L$ への**直交射影**と呼びます．