多變量分析

Chapter 2

資料處理的幾何觀念

Applied Multivariate Techniques

2.1 直角座標系

- p 維空間用 p 個通過原點且互相垂直的**直角座標軸**描述。 p 維上的點 A 記作$(a_1, a_2, \ldots, a_p)$，其中 a_p 為A點在第 p 軸的座標。

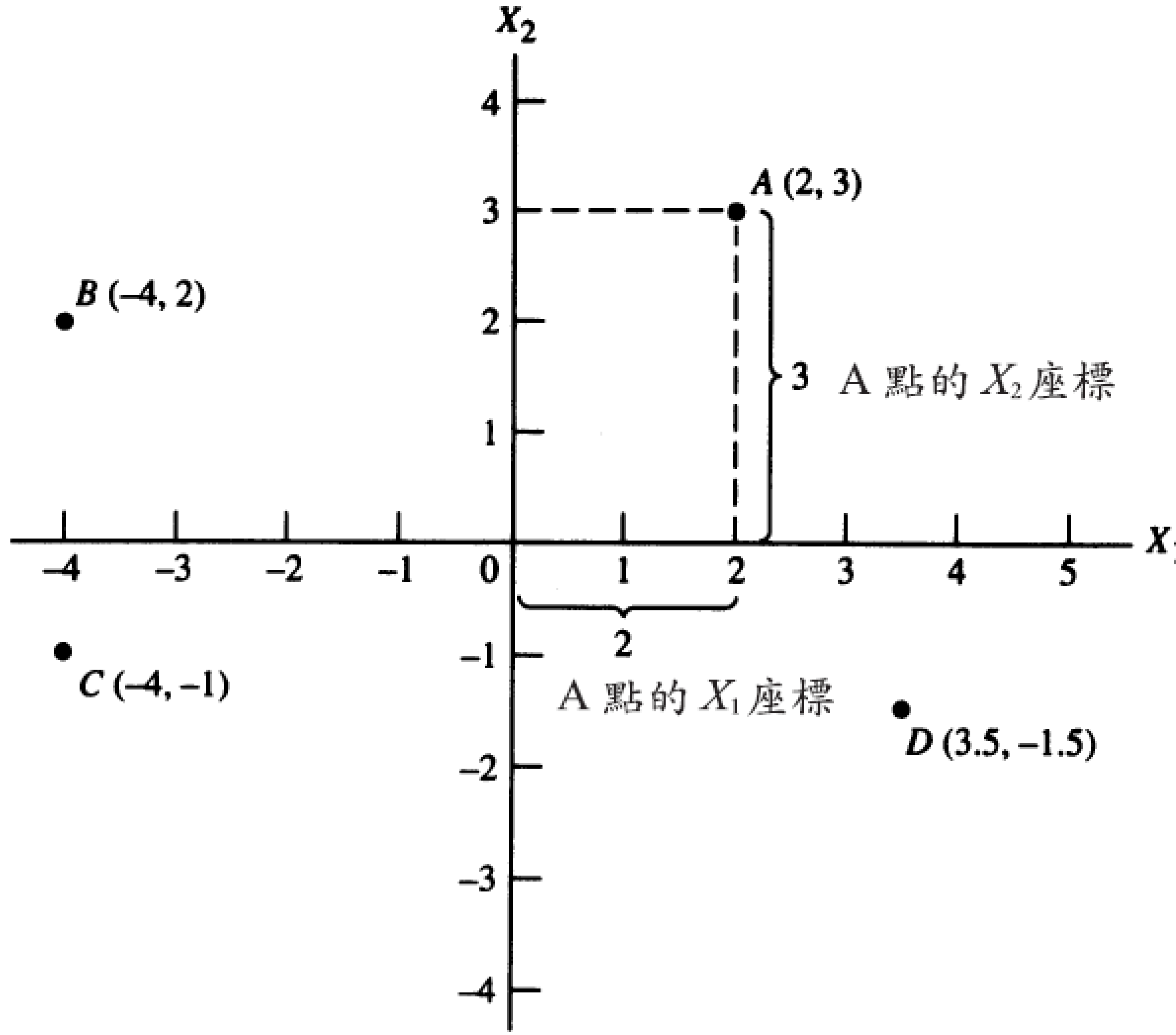


圖 2.1 相對於某一參考點的點座標

歐氏距離

- p維空間上兩點的歐氏距離為：

$$D_{AB} = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} (a_j - b_j)^2} \qquad (2.1)$$

其中 a_i、a_j 為 A 與 B 兩點在第j軸上的座標。

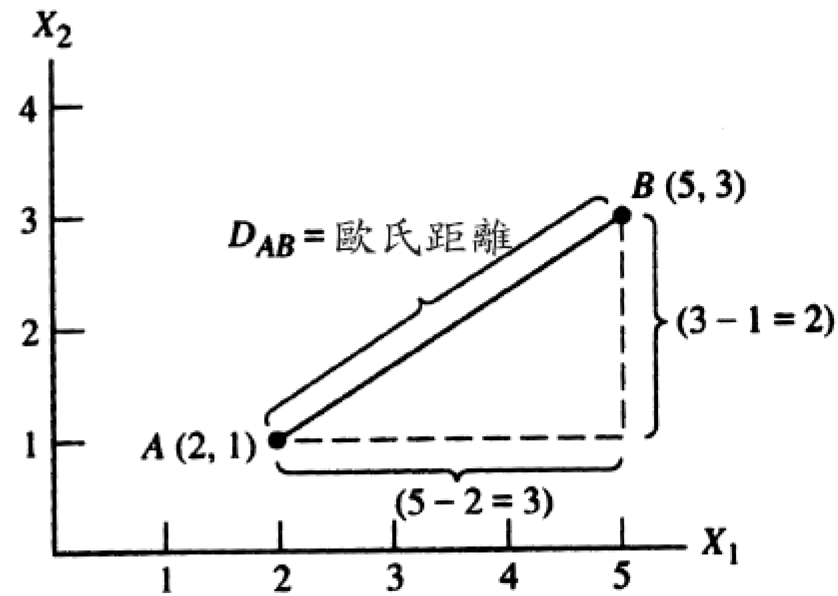


圖 2.3 兩點間的歐氏距離

2.2 向量

- 空間上的**向量(vector)**常用有向線段或射線描述。

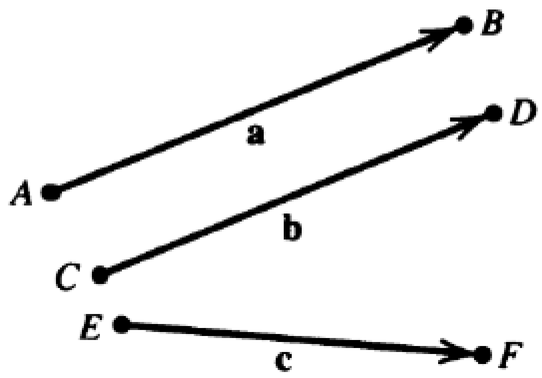


圖 2.4 向量

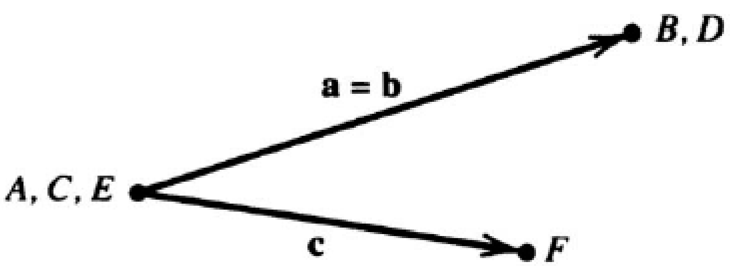


圖 2.5 向量平移

向量算術運算的幾何意義

- 向量乘一實數
  - 向量 **a** 乘一實數 k 得一新向量 **b**，其長度 **a** 為長度的 k 倍，實數k常稱為**純量(scalar)**。
    - $|k|>1$ 則**伸長(stretch)**向量，$|k|<1$ 則**縮短(compress)**向量。
    - 若 k 為正數則向量方向不變，若為負數則向量反向，稱為向量的**鏡射**或**反射(reflection)**。

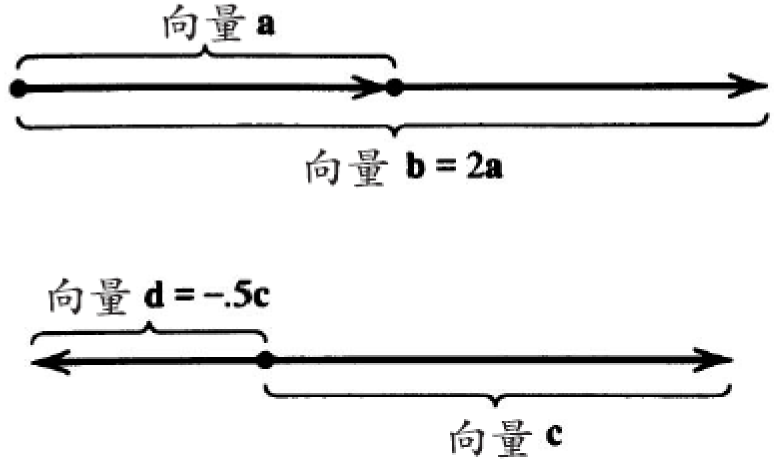


圖 2.6 向量乘以純量

向量算術運算的幾何意義(續)

- 向量的加減
  - 向量的加法
    - **a** + **b** 恰為以 **a**，**b** 為邊的平行四邊形的對角線
  - 向量的減法
    - 因此可得 **c** = **a**－**b** 一向量，其起點為 **b** 向量的終點，其終點為 **a** 向量的終點。

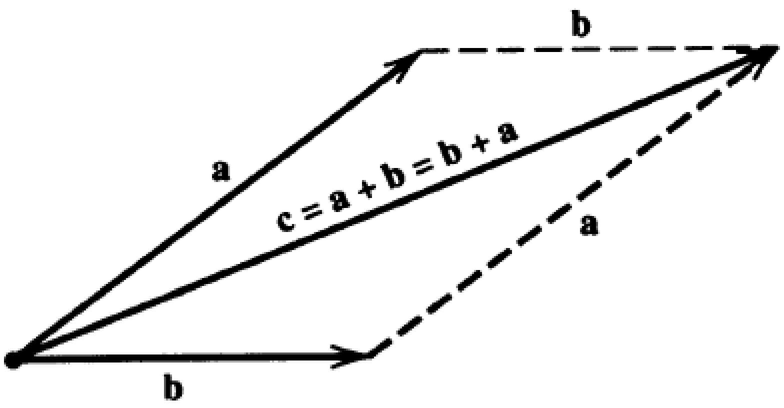


圖 2.7 向量相加

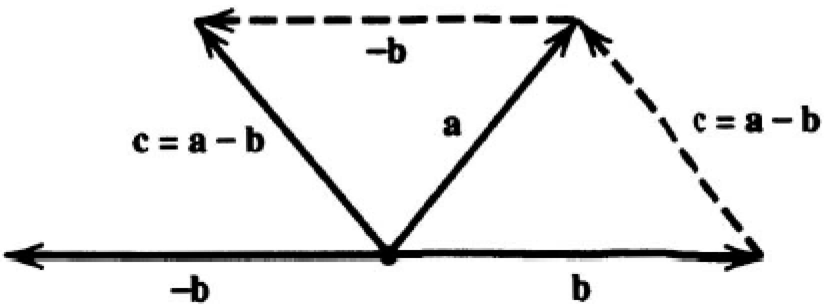
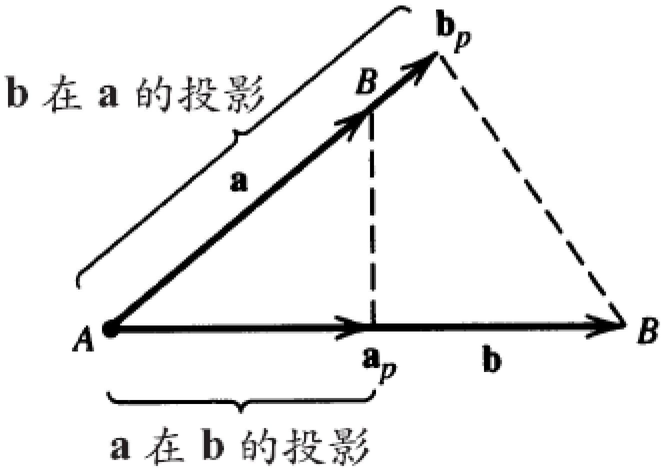


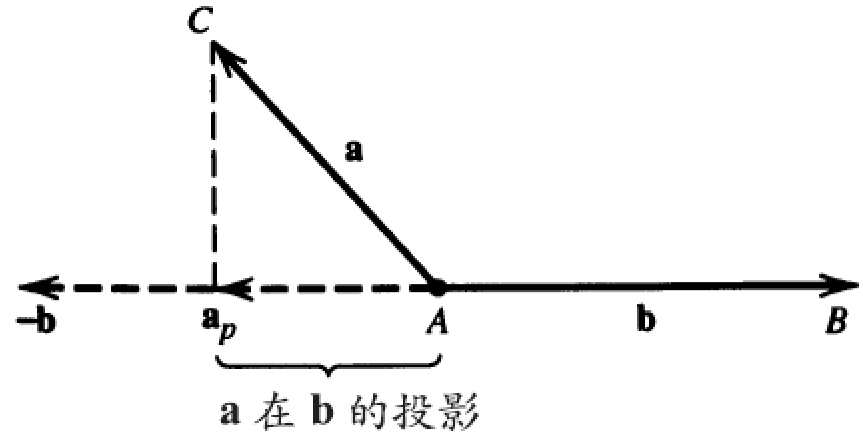
圖 2.8 向量相減

向量算術運算的幾何意義(續)

- 兩向量相乘
  - 兩向量相乘若得一純量，則稱為**純量積(scalar product)**或**內積(inner product)**或**點積(dot product)**。細節見2.4.4節。



圖之 I



圖之 II

圖 2.9 向量的投影

2.3 直角座標系上的向量

- p 維上的 A 點，可用 p - 維向量 $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_p)$表示。而其原點即為零向量 $\mathbf{0}=(0, 0, \ldots, 0)$。

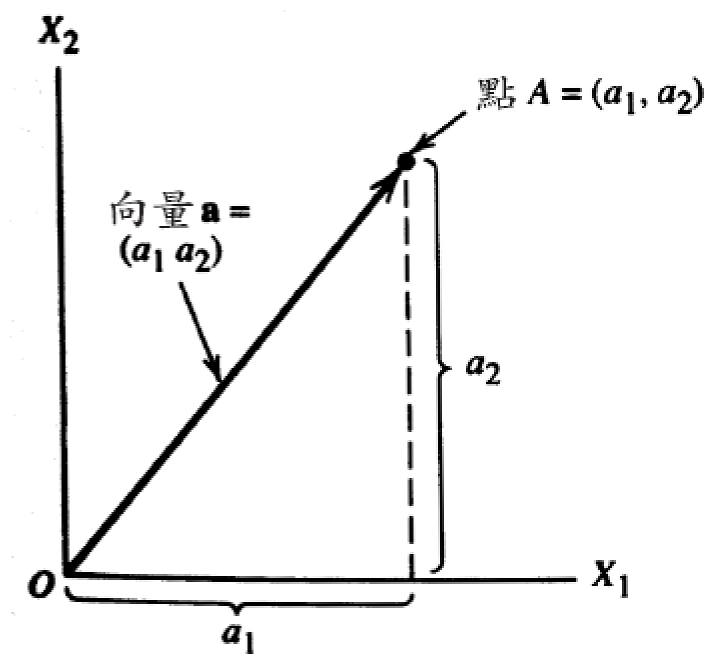


圖 2.10 直角座標系上的向量

長度與方向餘弦

- $\|\mathbf{a}\|$ 表示向量 $\mathbf{a}$ 的長。一般而言，p 維向量的長為：

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} a_j^2} \qquad (2.3)$$

其中 a_j 為第 j 個分量。

- 向量與兩軸的夾角的餘弦，稱為**方向餘弦(direction cosines)**。

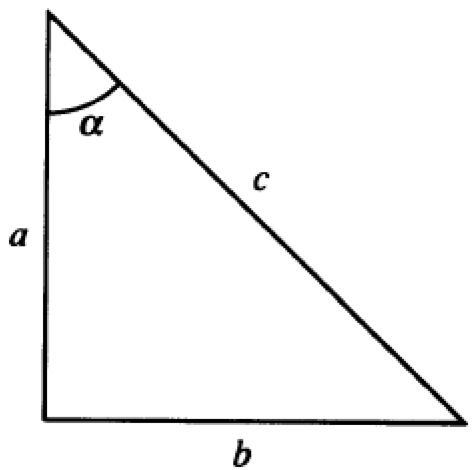


圖 2.11 三角函數

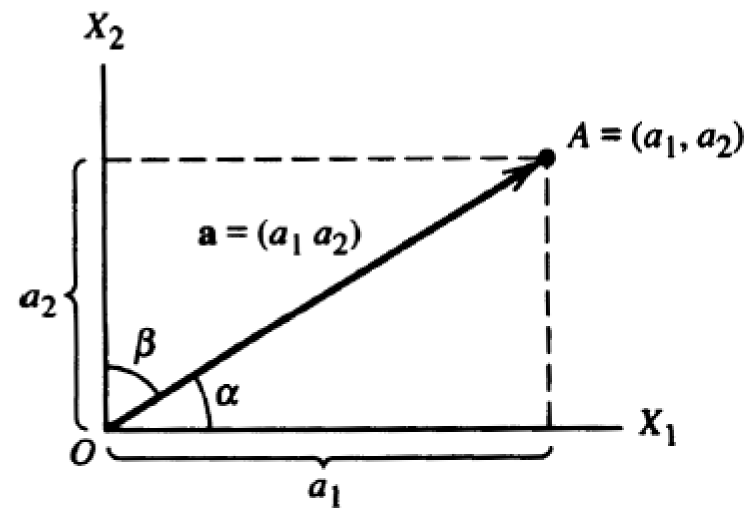


圖 2.12 長與方向餘弦

$$\cos\alpha = \frac{a_1}{\|\mathrm{a}\|} = \frac{a_1}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}}$$

$$\cos\beta = \frac{a_2}{\|\mathrm{a}\|} = \frac{a_2}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}}.$$

標準基向量

- 向量 $\mathbf{e} = (1, 0)$ 及 $\mathbf{e}_2 = (0, 1)$，稱為**標準基向量(standard basis vectors)**。

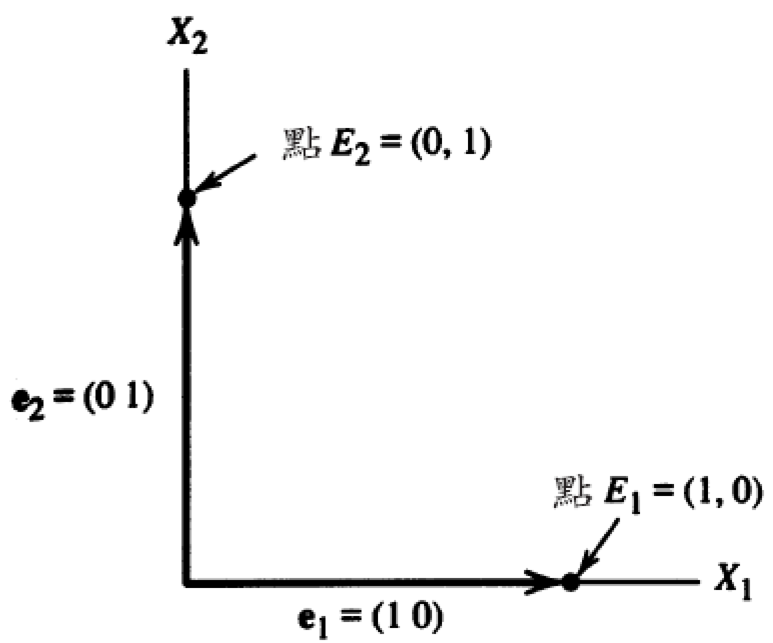


圖 2.13 標準基向量

2.4 向量運算的代數公式

- 算術運算
- 考慮 $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_p)$ 及 $\mathbf{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_p)$兩向量，則：
  - 向量乘以純量

$$k\mathbf{a} = (ka_1, ka_2, \ldots, ka_p) \tag{2.6}$$

  - 向量的加減

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \ldots, a_p + b_p) \tag{2.7}$$

$$\mathbf{a} - \mathbf{b} = (a_1 - b_1, a_2 - b_2, \ldots, a_p - b_p) \tag{2.8}$$

  - 兩向量的純量積

$$\mathbf{ab} = a_1b_1 + a_2b_2 + \ldots + a_pb_p \tag{2.9}$$

線性組合

- 空間上每一點都可寫成基底向量的線性組合。
- 即 $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_p)$ 可寫成：

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 + \ldots + a_p\mathbf{e}_p \qquad (2.10)$$

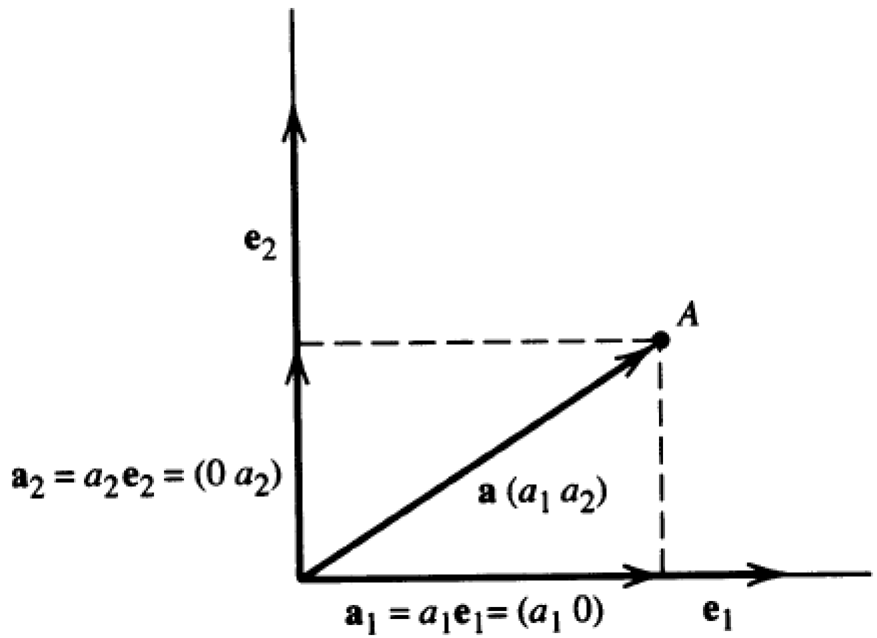

$\mathbf{e}_2$
A
$\mathbf{a}_2 = a_2\mathbf{e}_2 = (0\ a_2)$
$\mathbf{a}\ (a_1\ a_2)$
$\mathbf{a}_1 = a_1\mathbf{e}_1 = (a_1\ 0)$
$\mathbf{e}_1$

圖 2.14 線性組合

兩向量的距離與夾角

- 向量 **a**、**b** 的距離，即為

$$\|\mathbf{c}\| = \sqrt{\|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 - 2\|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\| \cos\alpha} \quad (2.12)$$

其中 $\cos \alpha$為**a**、**b**兩向量的夾角。

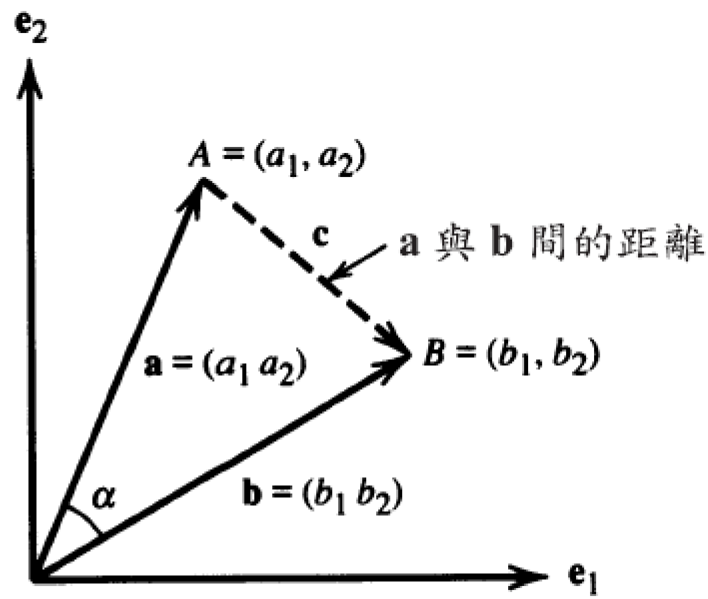


圖 2.15 兩向量的距離與夾角

純量積及向量投影

- 兩向量的純量積定義為

$$\mathbf{ab} = \|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{b}\| \cdot \cos\alpha \qquad (2.13)$$

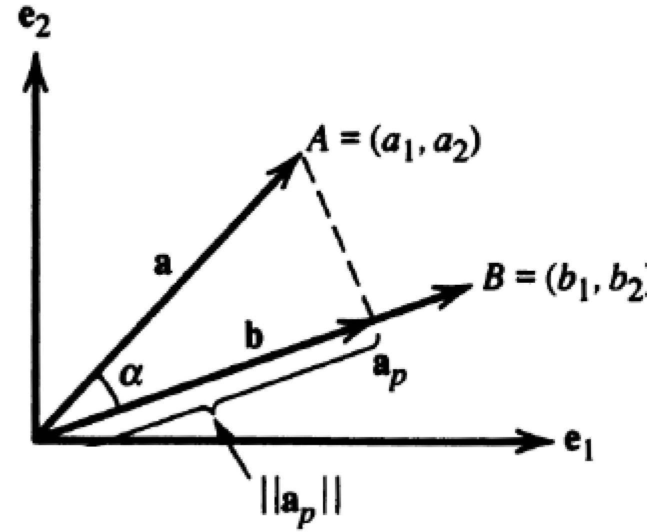
其中 **ab** 為 **a** 及 **b** 的純量積，α為 **a**、**b** 兩向量的夾角。

- **a** 在 **b** 的投影向量為 $\mathbf{a}_p$，$\mathbf{b}_p$的向量長為：

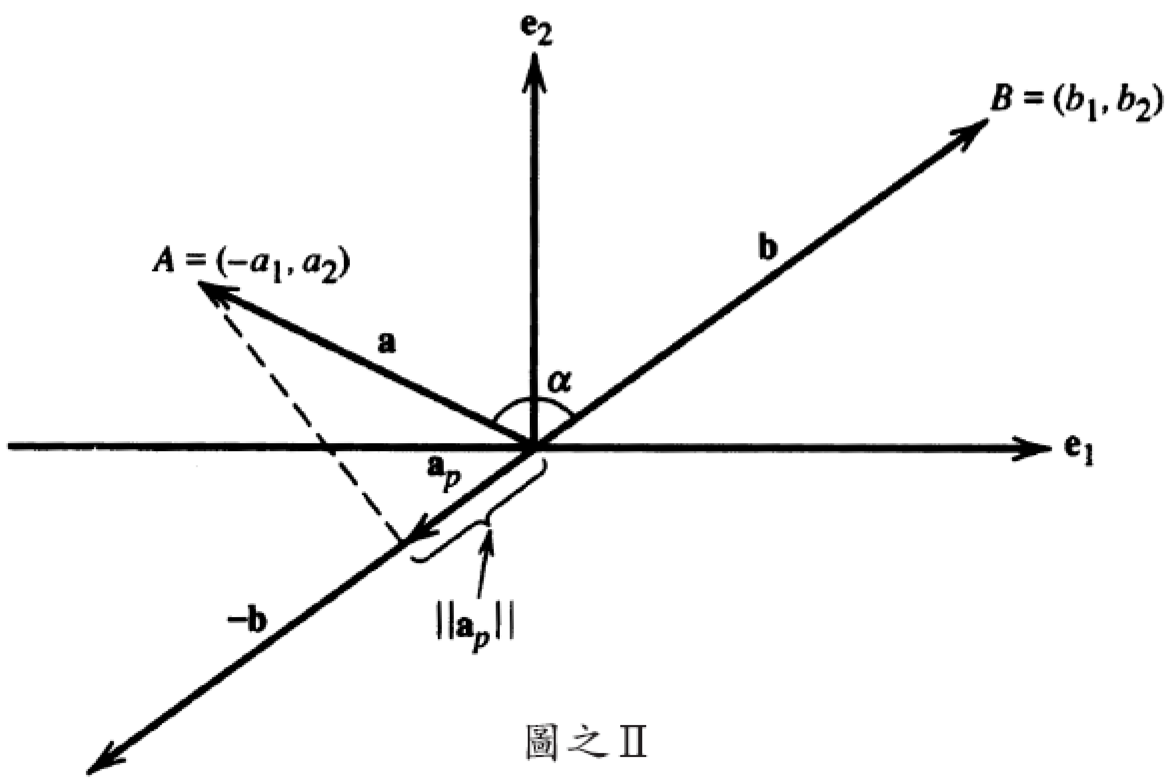
$$\|\mathbf{a}_p\| = \|\mathbf{a}\| \cos\alpha \qquad (2.14)$$

- 投影向量可寫成

$$\mathbf{a}_p = \frac{\|\mathbf{a}_p\| \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{b}\|} \qquad (2.17)$$



圖之 I



圖之 II

圖 2.16 純量積及向量投影

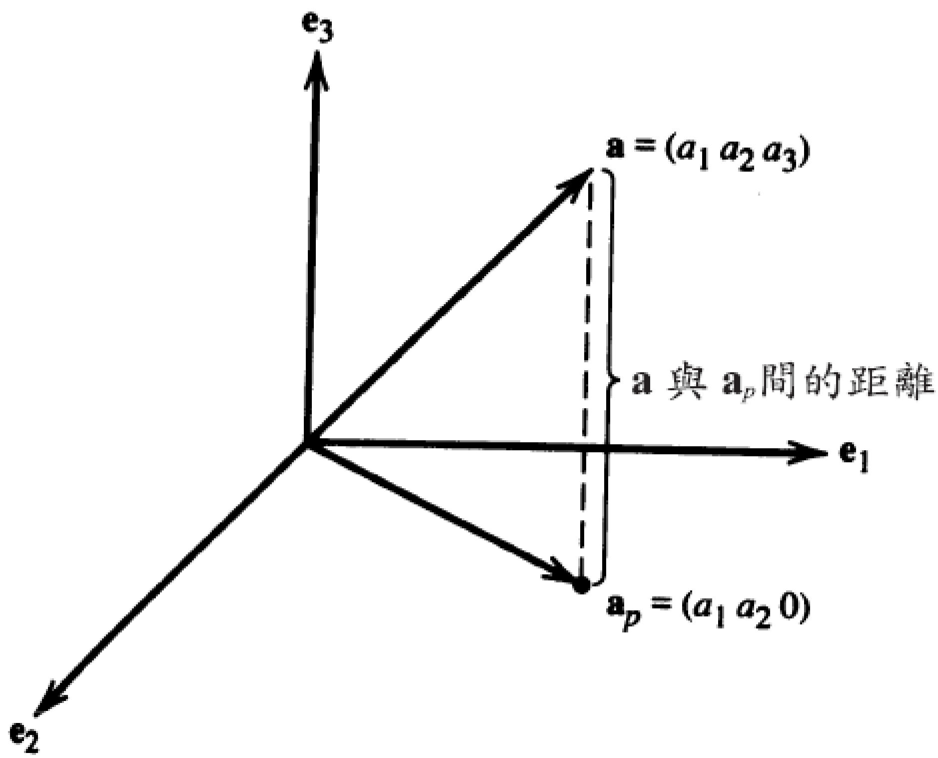


圖 2.17 向量在子空間的投影

2.5 向量獨立與維度

- p 個向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \ldots, \mathbf{a}_p$ 為線性獨立，若且唯若沒有向量是其餘向量的線性組合。
- 能衍生出給定空間的線性獨立向量的個數決定該空間的維度(dimensionality)。

2.6 變換基底

- 同一點 *A* 對某一基底的描述變換成對另一基底的描述過程稱為**變換基底(change in basis)**

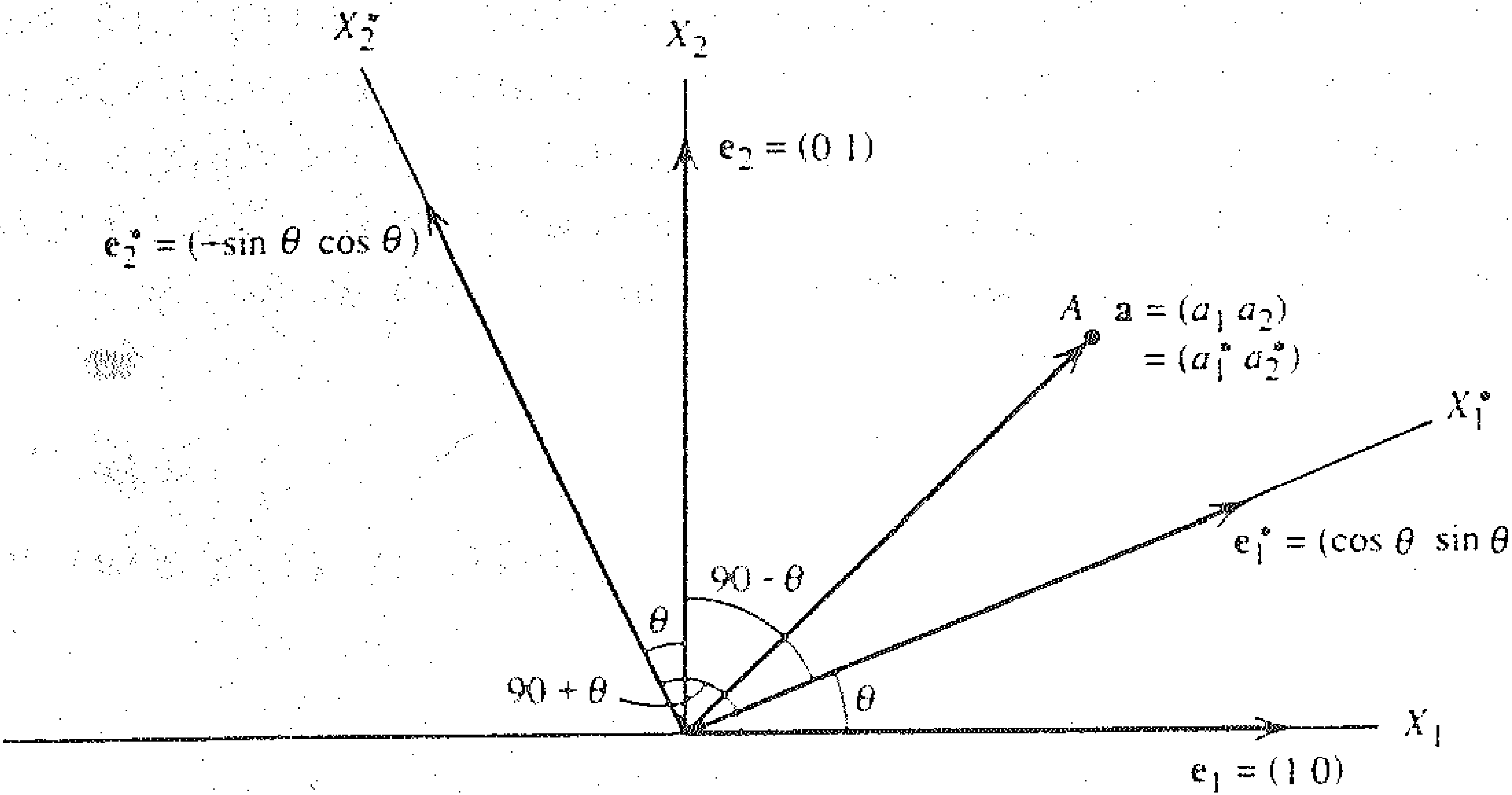


Figure 2.20 Representing points with respect to new axes.

純量積及向量投影

- Projection of e_1 on e_1^* is $\| e_1 \| \cos(\theta) = \cos(\theta)$

- Projection of e_1 on e_2^* is $\| e_1 \| \cos(90+\theta) = -\sin(\theta)$

  $\cos(90+\theta) = \cos(90)\cos(\theta) - \sin(90)\sin\theta = 0 \mathrm{x} \cos(\theta) - 1 \mathrm{x} \sin\theta$

- Projection of e_2 on e_1^* is $\| e_2 \| \cos(90-\theta) = \sin(\theta)$
- $\cos(90-\theta) = \cos(90)\cos(\theta) + \sin(90)\sin\theta = 0 \mathrm{x} \cos(\theta) + 1 \mathrm{x} \sin(\theta)$

- Projection of e_2 on e_2^* is $\| e_2 \| \cos(\theta) = \cos(\theta)$

The projection of e_1 *on* e_1^* *is* $\cos(\theta)$ *and the projection of* e_1 *on* e_2^* *is* $\cos(90+\theta) = -sin\theta$.

The projection of e_2 *on* e_1^* *is* $\cos(\theta - 90) = \sin\theta$ *and the projection of* e_2 *on* e_2^* *is* $\cos\theta$.

$$\mathrm{e}_1 = \cos\theta \times \mathrm{e}_1^* - \sin\theta \times \mathrm{e}_2^*.$$
$$\mathrm{e}_2 = \sin\theta \times \mathrm{e}_1^* + \cos\theta \times \mathrm{e}_2^*.$$

$$\begin{aligned}\mathrm{a} &= a_1(\cos\theta \times \mathrm{e}_1^* - \sin\theta \times \mathrm{e}_2^*) + a_2(\sin\theta \times \mathrm{e}_1^* + \cos\theta \times \mathrm{e}_2^*) \\ &= (\cos\theta \times a_1 + \sin\theta \times a_2)\mathrm{e}_1^* + (-\sin\theta \times a_1 + \cos\theta \times a_2)\mathrm{e}_2^*.\end{aligned}$$

$$a_1^* = \cos\theta \times a_1 + \sin\theta \times a_2$$
$$a_2^* = -\sin\theta \times a_1 + \cos\theta \times a_2.$$

Home Work

- **#2.6**

$\mathbf{e}_1$ and $\mathbf{e}_2$ are the basis vectors representing the orthogonal axes E_1 and E_2, and $\mathbf{f}_1$ and $\mathbf{f}_2$ are oblique vectors representing the oblique axes F_1 and F_2. Vectors $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$ are given as follows:

$$\mathbf{a} = 0.500\mathbf{e}_1 + 0.866\mathbf{e}_2$$

$$\mathbf{b} = 0.700\mathbf{f}_1 + 0.500\mathbf{f}_2.$$

If the relationship between the orthogonal and oblique axes is given by

$$\mathbf{f}_1 = 0.800\mathbf{e}_1 + 0.600\mathbf{e}_2$$

$$\mathbf{f}_2 = 0.707\mathbf{e}_1 + 0.707\mathbf{e}_2$$

represent $\mathbf{a}$ with respect to $\mathbf{f}_1$ and $\mathbf{f}_2$ and $\mathbf{b}$ with respect to $\mathbf{e}_1$ and $\mathbf{e}_2$. What is the angle between $\mathbf{a}$ and $\mathbf{b}$?