2010 年 01 月 19 日

シュワルツの不等式の初等的な証明

新潟工科大学 情報電子工学科 竹野茂治

1 はじめに

先日ある方から、「相関係数 r が 1 に等しい場合に、データ点が直線になるのはなぜか」と聞かれた。イメージとしてわかるように説明してもらいたいということだったが、それに関してやや初等的だろうと思われる証明を考えてみたので、ここにまとめておく。

2 相関係数とシュワルツの不等式

その方の言うには、相関係数 r は、

$$r = \frac{S_{xy}}{\sqrt{S_{xx}S_{yy}}} = \frac{\displaystyle\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\displaystyle\sum_i (x_i - \bar{x})^2}\sqrt{\displaystyle\sum_i (y_i - \bar{y})^2}} \tag{1}$$

であり、分子は (x_i, y_i) というデータ点と $(\bar{x}, \bar{y})$ を 2 頂点とする長方形の面積の和だけど、分母がよくわからない、$(x_i - \bar{x})^2$ は $|x_i - \bar{x}|$ を一辺とする正方形の面積だから、その正方形の面積を全部足したものを面積とするような正方形の一辺の長さが $\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2}$ なんだろうけど、それと y に対する同じようなものをかけたものは一体どういう意味か、という話であった。

確かに上記の話自体に誤りはないし、相関係数をイメージするために数式を図形的にとらえようと考える工夫も論理的で非常に面白い。ただ、それで分母に意味付けがなされて、相関係数を視覚的に捉えることができるようになるかというと、残念ながら私にはよくわからない。

実際、私は相関係数が 1 のときにそれが直線になる、という説明を講義で行うときはベクトルの内積を使って説明している。実は、相関係数が -1 から 1 の間にあること、そしてそれが ± 1 のときに点が直線的に並ぶこと、という部分は、以下の **シュワルツの不等式** から導かれる (ほぼ同等である)。

定理 1 (シュワルツの不等式)

正の実数 a_i, b_i $(i = 1, 2, \ldots, N)$ に対して、次の不等式が成り立つ。

$$\sum_{i=1}^{N} a_i b_i \leq \sqrt{\sum_{i=1}^{N} a_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{N} b_i^2} \tag{2}$$

なお、等号が成立するのは、

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{b_2}{a_2} = \cdots = \frac{b_N}{a_N} \tag{3}$$

の場合のみである。

このシュワルツの不等式は、N 次元ベクトルの内積に対する不等式

$$|\vec{a} \cdot \vec{b}| \leq |\vec{a}||\vec{b}|$$

と同等であることが知られているし、他にもシュワルツの不等式の証明は 2 次式の判別式を利用する方法、あるいは (2) の両辺を 2 乗した式の差を 2 乗の和の形に変形する方法などがあるが、いずれも途中の式変形がやや面倒であるし、またその方はベクトルや内積は忘れておられるようだったので、その方のアイデアを参考に、図形による証明を考えてみた。それを 3 節で紹介する。ただし、定理 1 全体を図形で考えるのはさすがに無理があるので、それは前半の一部分だけである。

その前に、シュワルツの不等式と相関係数の関係について先に紹介しておく。まず、シュワルツの不等式 (2) は、a_i, b_i が正でなくても成立することに注意する。それは、定理 1 が成り立つならば、a_i, b_i が正でなくても 0 であるものが含まれていなければ、それらの絶対値を考えることで定理 1 より

$$\sum_{i=1}^{N} a_i b_i \leq \sum_{i=1}^{N} |a_i||b_i| \leq \sqrt{\sum_{i=1}^{N} |a_i|^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{N} |b_i|^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^{N} a_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^{N} b_i^2}$$

となるからである。この場合も等号が成立するのは、この 2 つの不等号がともに等号となる場合だから、すべての i に対して a_i と b_i の符号が等しく $(a_i b_i = |a_i||b_i|)$、かつ

$$\frac{|b_1|}{|a_1|} = \frac{|b_2|}{|a_2|} = \cdots = \frac{|b_N|}{|a_N|}$$

が成り立つ場合なので、よって結局 (3) と同じになる。

0 になるものが含まれている場合でも、例えば簡単のため $N=3$ で、$a_1=0$、a_2,a_3,b_2,b_3 は 0 ではないとすると、

$$\begin{aligned}
&a_1b_1+a_2b_2+a_3b_3=a_2b_2+a_3b_3\leq\sqrt{a_2^2+a_3^2}\sqrt{b_2^2+b_3^2}\\
&\quad\leq\ \sqrt{a_1^2+a_2^2+a_3^2}\sqrt{b_1^2+b_2^2+b_3^2}
\end{aligned}$$

となってシュワルツの不等式 (2) は成立する。等号が成り立つのは、上の 2 つの不等号が等号になる場合だから、

$$\frac{b_2}{a_2}=\frac{b_3}{a_3},\quad a_1=b_1=0$$

でなくてはならない。今仮に 0/0 はすべての比に等しいとみることにすれば、等号成立条件 (3) は、0 が含まれていても成立することになる。ただしその場合は、a_i か b_i の一方が 0 ならば、もう一方も 0 でなければならないことを意味する。

さて、相関係数に話を戻そう。(2) の不等式のすべての a_i を $-a_i$ と変えた式を書けば、

$$-\sum_{i=1}^N a_ib_i\leq\sqrt{\sum_{i=1}^N a_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^N b_i^2}$$

となるので、これと (2) を組み合わせれば、

$$-\sqrt{\sum_{i=1}^N a_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^N b_i^2}\leq\sum_{i=1}^N a_ib_i\leq\sqrt{\sum_{i=1}^N a_i^2}\sqrt{\sum_{i=1}^N b_i^2}\qquad(4)$$

となることがわかる。(1) より、この a_i,b_i を $a_i=x_i-\bar{x}, b_i=y_i-\bar{y}$ として、辺々を平方根の式で割れば $-1\leq r\leq 1$ が言えることになる。

そして、$r=1$ となるのは、条件 (3) と上の考察より、すべての i に対して $x_i-\bar{x}$ と $y_i-\bar{y}$ が同符号で

$$\frac{y_1-\bar{y}}{x_1-\bar{x}}=\frac{y_2-\bar{y}}{x_2-\bar{x}}=\cdots=\frac{y_N-\bar{y}}{x_N-\bar{x}}$$

の場合となる。この比を α とすれば $\alpha>0$ で、すべての i に対して

$$y_i-\bar{y}=\alpha(x_i-\bar{x})$$

となるわけだから、すべての点 (x_i,y_i) が傾き α の直線

$$y-\bar{y}=\alpha(x-\bar{x})$$

に乗ることとなる。

一方 $r=-1$ の場合は、すべての a_i を $-a_i$ に置きかえた方の等号成立条件だから、すべての i に対して $x_i-\bar{x}$ と $y_i-\bar{y}$ が異符号で

$$\frac{y_1-\bar{y}}{x_1-\bar{x}}=\frac{y_2-\bar{y}}{x_2-\bar{x}}=\cdots=\frac{y_N-\bar{y}}{x_N-\bar{x}}$$

の場合となる。だからこの比を α とすれば $\alpha<0$ となる。あとは、上と同様にすべての点が $y-\bar{y}=\alpha(x-\bar{x})$ の上にあることになる。

3 $N=2$ の図形的な証明

本節では、定理 1 の $N=2$ の場合に限って、図形的な証明を試みる。よってこの場合示すべきは、正の実数 a_1,a_2,b_1,b_2 に対して

$$a_1b_1+a_2b_2\leq\sqrt{a_1^2+a_2^2}\sqrt{b_1^2+b_2^2} \tag{5}$$

が成り立つことと、この等号が成立するのが

$$\frac{b_1}{a_1}=\frac{b_2}{a_2} \tag{6}$$

のとき、ということになる。

まず、以下の 2 つの長方形 (図 1) を見比べて見てもらいたい。

この 2 つの長方形は、いずれも底辺 a_1+b_2, 高さ b_1+a_2 で、4 つの直角三角形の配置を変えただけの同じ長方形なので、

$$S_1+S_2=S_3 \tag{7}$$

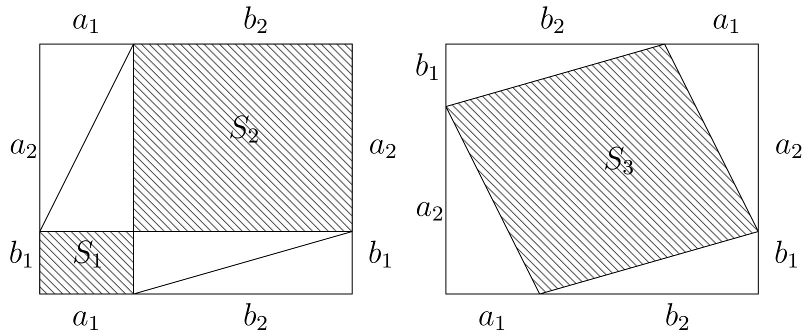

図 1: 2 つの長方形

であることがわかる。この左辺は $S_1 + S_2 = a_1b_1 + a_2b_2$ であるから (5) の左辺に等しく、また S_3 は平行四辺形で、その 2 辺は三平方の定理より

$$\sqrt{a_1^2 + a_2^2}, \quad \sqrt{b_1^2 + b_2^2}$$

であることがわかる。2 辺が決まった平行四辺形は、高さが最も高いときに面積は最大となるので、よってその平行四辺形の面積は、その 2 辺が直角となった長方形の面積以下となる。すなわち

$$S_3 \leq \sqrt{a_1^2 + a_2^2}\sqrt{b_1^2 + b_2^2} \tag{8}$$

となる。よって (7), (8) から (5) が成り立つことが示されたことになる。

次に、(5) の等号成立条件であるが、これは (8) の等号が成り立つとき、すなわち S_3 が長方形となるときを意味する (図 2)。

この場合は、図からわかるように、a_1, a_2 が直角を挟む直角三角形と b_1, b_2 が直角を挟む直角三角形とが相似になるので、よって (6) が成り立つことになる。しかも、斜辺の比も考えれば、

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{b_2}{a_2} = \frac{\sqrt{b_1^2 + b_2^2}}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}} \tag{9}$$

となることもわかる。

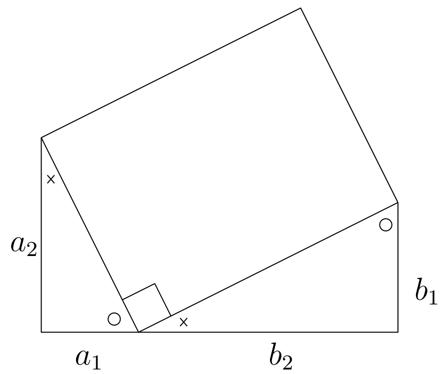

図 2: S_3 が長方形の場合

4 $N \geq 3$ の場合

$N \geq 3$ の場合の定理 1 の証明は、3 節の $N = 2$ の場合の不等式 (5) を繰り返し用いることで示される (厳密には帰納法)。

例えば $N = 3$ の場合を考えてみる。今、

$$A = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}, \quad B = \sqrt{b_1^2 + b_2^2}$$

として、(5) の両辺に a_3b_3 を加えると、

$$a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 \leq \sqrt{a_1^2 + a_2^2}\sqrt{b_1^2 + b_2^2} + a_3b_3 = AB + a_3b_3 \tag{10}$$

となる。この $AB + a_3b_3$ に、$N = 2$ のシュワルツの不等式 (5) を適用すれば、

$$AB + a_3b_3 \leq \sqrt{A^2 + a_3^2}\sqrt{B^2 + b_3^2} \tag{11}$$

となることがわかる。ここで、

$$A^2 + a_3^2 = a_1^2 + a_2^2 + a_3^2, \quad B^2 + b_3^2 = b_1^2 + b_2^2 + b_3^2$$

であるから、結局 (10), (11) により $N = 3$ のシュワルツの不等式 (2) が示されたことになる。

この等号成立条件は、(10), (11) の両方で等号が成立する場合であるから、

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{b_2}{a_2}, \quad \frac{B}{A} = \frac{b_3}{a_3}$$

であることがわかる。しかし、前者の等号成立の場合は (9) が成り立っていたので、結局

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{b_2}{a_2} = \frac{B}{A} = \frac{b_3}{a_3}$$

であることがわかり、よって $N=3$ の (3) が言えたことになる。そしてこの比は (9) により

$$\frac{\sqrt{B^2+b_3^2}}{\sqrt{A^2+a_3^2}} = \frac{\sqrt{b_1^2+b_2^2+b_3^2}}{\sqrt{a_1^2+a_2^2+a_3^2}}$$

に等しいことも言える。

後はこれを繰り返していけば、すべての自然数 N に対して定理 1 が成り立つことがわかる。

5 最後に

3 節の図形的な証明は、元の質問者の発想に触発されたものではあるが、実は図 1 は $a_1 = b_1$, $a_2 = b_2$ の場合は三平方の定理の証明にの一つとして有名なものであり、よって本稿はそれほど目新しいものではないと思う。

また、その長方形も本来の相関係数の方の 2 点 (a_1, b_1), (a_2, b_2) とは並び方がだいぶ違っているので、本稿の説明は元の質問者の方の期待に添えるものではないだろう。

ただ、この証明からシュワルツの不等式や相関係数自体が、容易に視覚的にイメージできるものではないことはわかってもらえるのではないかと思う。実際その方にも、こういう状況なので、イメージとして認識することは難しく、そういうものだと思って使うのがよいのでは、ということで堪忍してもらった次第である。