

作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	https://github.com/Visualize-ML
平台	https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

1.6 向量内积



本节你将掌握的核心技能：

- ▶ 内积计算：对应分量相乘再求和，结果为标量。
- ▶ 内积运算性质：掌握交换律、分配律、数乘结合律等基本代数性质。
- ▶ 几何意义：内积等于两个向量长度与其夹角余弦值的乘积。
- ▶ 判断正交性：利用内积为零判断两个向量是否正交。
- ▶ 夹角与相似性关系：夹角越小，向量方向越相近。

向量内积 (inner product)，也叫**标量积** (scalar product)、**点乘** (dot product)，是线性代数中一个核心概念，它在几何、物理和计算机科学中广泛应用。本节从代数和、几何两个角度来帮助大家理解内积。在代数视角下，内积是两个向量对应分量的乘积之和，满足交换律、分配律和数乘结合律，并能用于向量模长计算。在几何视角下，内积描述了两个向量长度与其夹角余弦值的关系，进而用于判断向量的方向关系，如正交性。本章后文会探讨向量内积在正交投影等方面的应用。

代数视角

给定维数相同的列向量 \mathbf{a} 、 \mathbf{b}

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad (1)$$

\mathbf{a} 、 \mathbf{b} 的向量内积为对应分量相乘后求和，结果为标量，即

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_n b_n = \sum_{i=1}^n a_i b_i \quad (2)$$

其中， Σ 是求和符号； Σ 下方 $i = 1$ 意味着求和从索引 i 从 1 开始，一直累加到 $i = n$ 。

$a_i b_i$ 表示两个向量在第 i 个分量相乘。

\mathbf{a} 、 \mathbf{b} 的内积也可以记作 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$ ；本书一般用一个实心圆点 \cdot 作为向量内积的运算符。注意，不可以省略 \cdot 这个点。

举个例子，如下两个 3 维向量的标量积（内积、点乘），

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} = 1 \times 4 + 2 \times 5 + 3 \times 6 = 4 + 10 + 18 = 32 \quad (3)$$

代码 1 展示如下用 NumPy 完成向量内积，并进行验算。代码很简单，请大家自行注释学习。

代码 1. 向量内积 |  LA_01_05_01.ipynb

```
## 初始化
import numpy as np

## 定义两个向量
a_vec = np.array([1, 2, 3])
b_vec = np.array([4, 5, 6])

## 计算内积
a_dot_b = np.dot(a_vec, b_vec)

## 验算
a_vec * b_vec
sum(a_vec * b_vec)
```

向量内积常用性质

向量内积满足以下交换律、分配律、数乘结合律：

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &= \mathbf{b} \cdot \mathbf{a} \\ \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} + \mathbf{c}) &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} \\ k(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) &= (k\mathbf{a}) \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a} \cdot (k\mathbf{b}) \end{aligned} \quad (4)$$

其中，向量 \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 、 \mathbf{c} 维数相等； k 为标量。

向量 \mathbf{a} 和自身内积为 \mathbf{a} 所有分量平方和

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = \|\mathbf{a}\|^2 = a_1^2 + a_2^2 + \cdots + a_n^2 \quad (5)$$

显然， $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} \geq 0$ ；如果 $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = 0$ ，当且仅当 $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ 。

如果参与内积运算的一个向量为全 1 向量，比如

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{1} = a_1 + a_2 + \cdots + a_n \quad (6)$$

上式结果相当于对 \mathbf{a} 所有分量求和。

几何视角

向量内积的定义看上去特别简单，其中却蕴藏着丰富的几何内涵。

从几何角度来看，向量 \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 的内积等于 \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 的长度相乘，再乘以两者夹角的余弦值，即

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \cos \theta \quad (7)$$

如图 1 (a) 所示， $\|\mathbf{a}\|$ 、 $\|\mathbf{b}\|$ 为向量的长度 (大小、模、 L^2 范数、欧几里得范数)； θ 为 \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 两个向量之间的夹角。

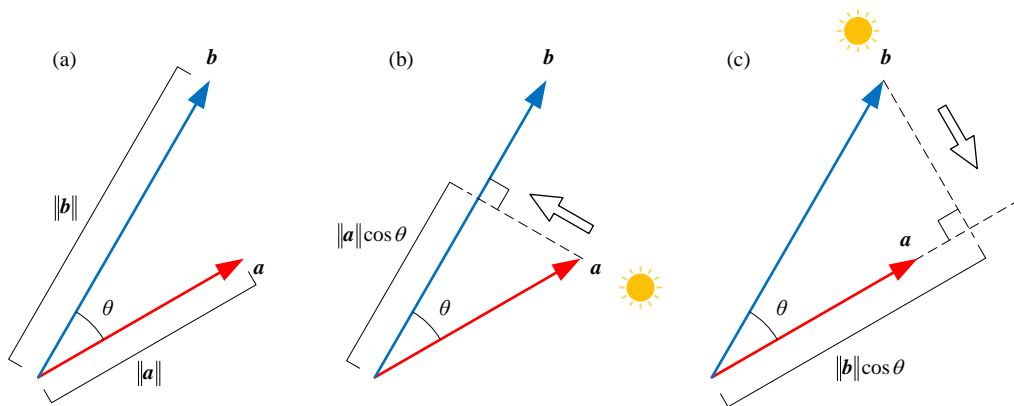


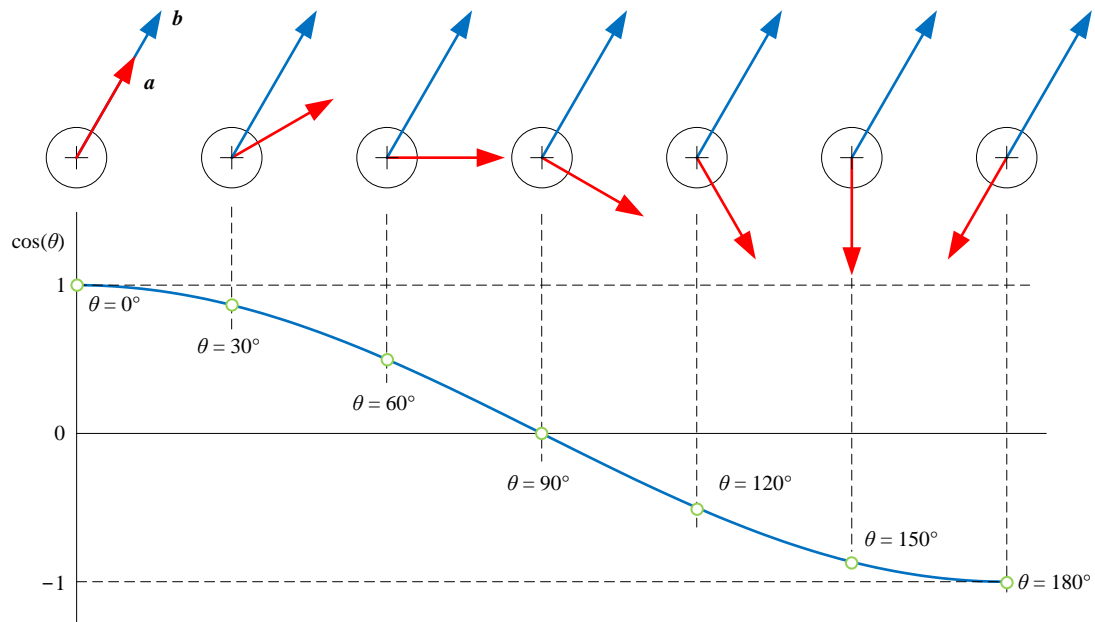
图 1. 几何视角看向量内积

如图 1 (b) 所示， $\|\mathbf{a}\| \cos \theta$ 相当于向量 \mathbf{a} 在向量 \mathbf{b} 方向上的“影子”；我们管这个投影长度叫做**标量投影** (scalar projection)。本章后面将专门介绍标量投影。

类似地，如图 1 (c) 所示， $\|\mathbf{b}\| \cos \theta$ 相当于向量 \mathbf{b} 在向量 \mathbf{a} 方向上的**标量投影**。

夹角

上式说明，向量的内积不仅与它们的长度 (模、 L^2 范数) 相关，还与它们的夹角的余弦值相关。如图 2 所示，给定 $\|\mathbf{a}\|$ 、 $\|\mathbf{b}\|$ ， $\|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \cos \theta$ 随 θ 变化。注意， \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 均为非零向量。

图 2. 向量内积随 θ 变换, a 、 b 长度 (模、 L^2 范数) 固定

当 $\theta = 0^\circ$ 时, a 、 b 同向, 内积最大 ($\cos(0^\circ) = 1$)。

当 $0^\circ < \theta < 90^\circ$ 时, a 、 b 夹角为**锐角** (acute angle), $a \cdot b > 0$ 。

当 $\theta = 90^\circ$ 时, a 、 b 夹角为**直角** (right angle), 也叫 a 、 b **正交** (orthogonal), $a \cdot b = 0$ ($\cos(90^\circ) = 0$); 我们管这种向量组叫做**正交向量** (orthogonal vectors), 即彼此正交 (但不要求向量为单位向量)。

当 $90^\circ < \theta < 180^\circ$ 时, a 、 b 夹角为**钝角** (obtuse angle), $a \cdot b < 0$ 。

当 $\theta = 180^\circ$ 时, a 、 b 反向, 内积最小 ($\cos(180^\circ) = -1$)。

如果 a 、 b 均为非零向量, 可以整理得到

$$\cos \theta = \frac{a \cdot b}{\|a\| \|b\|} \quad (8)$$

也可以写成


$$\cos \theta = \frac{\frac{a}{\|a\|} \cdot \frac{b}{\|b\|}}{1} \quad (9)$$

其中, $\frac{a}{\|a\|}$ 、 $\frac{b}{\|b\|}$ 分别为 a 、 b 的方向向量 (单位向量)。

代码 2 计算向量夹角。下面聊聊其中关键词句。

- a** 用 `numpy.array()` 定义了两个向量 `vector1` 和 `vector2`。
- b** 用 `numpy.dot(vector1, vector2)` 计算了两个向量的内积。`np.dot(a, b)` 函数用于计算两个向量的点积, 即它会将两个向量的对应元素相乘并求和。
- c** 用 `numpy.linalg.norm()` 函数计算 `vector1` 和 `vector2` 的向量长度 (模、 L^2 范数、欧几里得范数)。

- d 用内积除以两个向量的长度的乘积，以得到两个向量的夹角的余弦值。
- e 用 `numpy.arccos()` 计算了夹角的弧度值。
- f 用 `numpy.degrees()` 将夹角弧度值转换为角度值。

代码 2. 计算向量夹角 |  LA_01_05_02.ipynb

```
## 初始化
import numpy as np

## 定义两个向量
a vector1 = np.array([1, 1, 0])
vector2 = np.array([0, 1, 1])

## 计算内积
b dot_product = np.dot(vector1, vector2)

## 计算向量长度
c norm1 = np.linalg.norm(vector1)
norm2 = np.linalg.norm(vector2)

## 计算夹角的余弦值
d cos_theta = dot_product / (norm1 * norm2)

## 计算夹角（弧度）
e theta_rad = np.arccos(cos_theta)

## 计算夹角（角度）
f theta_deg = np.degrees(theta_rad)
```

RGB 中颜色向量关系

下面，让我们用向量内积分析 RGB 空间中颜色向量之间的关系。

RGB 空间中，红色向量 e_1 、绿色向量 e_2 、蓝色向量 e_3 两两内积为 0

$$e_1 \cdot e_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 0, \quad e_1 \cdot e_3 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0, \quad e_2 \cdot e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0 \quad (10)$$

这说明，红色向量 e_1 、绿色向量 e_2 、蓝色向量 e_3 两两正交，即向量夹角为 90 度。也就是说， e_1 、 e_2 、 e_3 为**正交向量**。

不仅如此， e_1 、 e_2 、 e_3 均为**单位向量**；我们管这种向量组叫做**正交单位向量** (orthonormal vectors)，即彼此正交且为单位向量的向量组。

也就是说，给定**正交单位向量组**，比如 e_1 、 e_2 、 e_3 ，其中的每个向量都与其他向量正交，且每个向量长度均为 1。

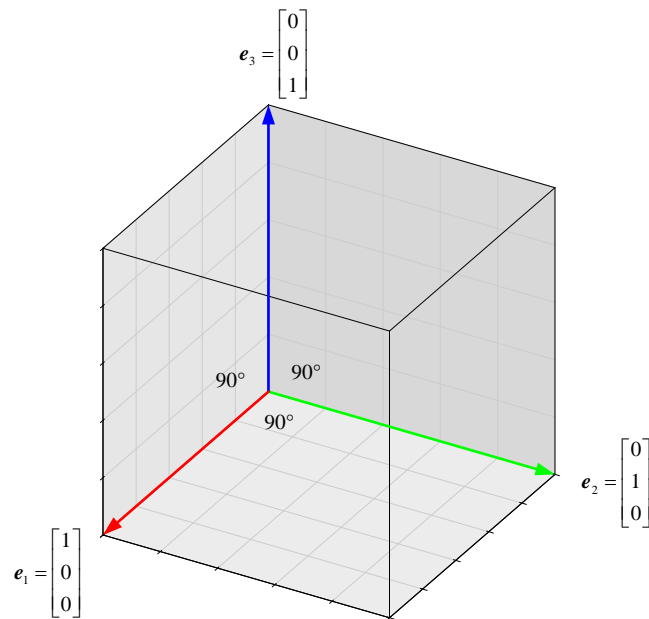


图 3. RGB 空间中的正交归一化向量

两个颜色向量内积为零，这意味着这两种颜色的分量完全独立，没有共同的色彩成分。

比如，图 4 中，和红色向量正交的颜色向量有绿色、蓝色，还有青色。

青色由蓝色、绿色线性组合而成；换个角度来看，蓝色、绿色线性组合的任意颜色向量都和红色正交。也就是说，红色向量垂直于“蓝绿”平面。

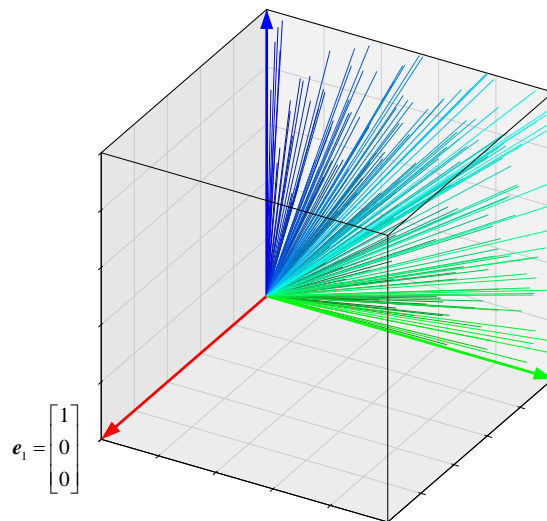


图 4. RGB 空间中，红色向量和整个“蓝绿”平面正交

类似地，如图 5 (a) 所示，蓝色向量垂直整个“红绿”平面；如图 5 (b) 所示，绿色向量垂直于整个“红蓝”平面。

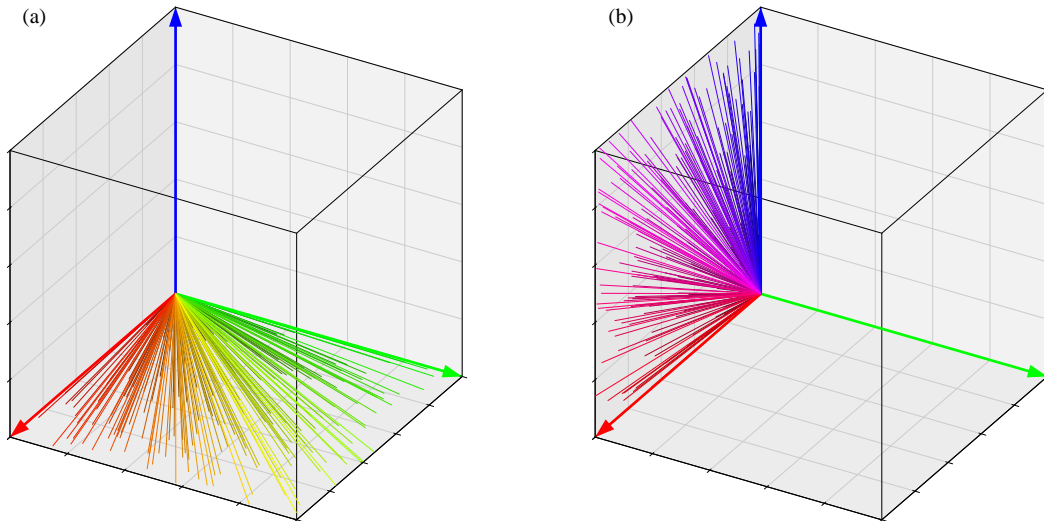


图 5. RGB 空间中，蓝色向量垂直整个“红绿”平面，绿色向量垂直于整个“红蓝”平面

黄色向量由红色向量、绿色向量相加而成，显然红色向量、黄色向量不在正交。

红色向量 e_1 、黄色向量 $e_1 + e_2$ 的内积为 1

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 1 \quad (11)$$

红色向量的长度为 1；黄色向量的长度为 $\sqrt{2}$ 。红色向量、黄色向量夹角余弦值为

$$\frac{1}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2} \times \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = \frac{1}{1 \times \sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (12)$$

从而计算红色向量、黄色向量的夹角为

$$\arccos\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) = 45^\circ \quad (13)$$

这说明虽然两个颜色不同，但是黄色中含有一定的红色，两个颜色有重叠。

请大家计算，绿色向量、黄色向量的夹角。

此外，请大家思考图 6 中还有哪些向量之间夹角为 45° 。

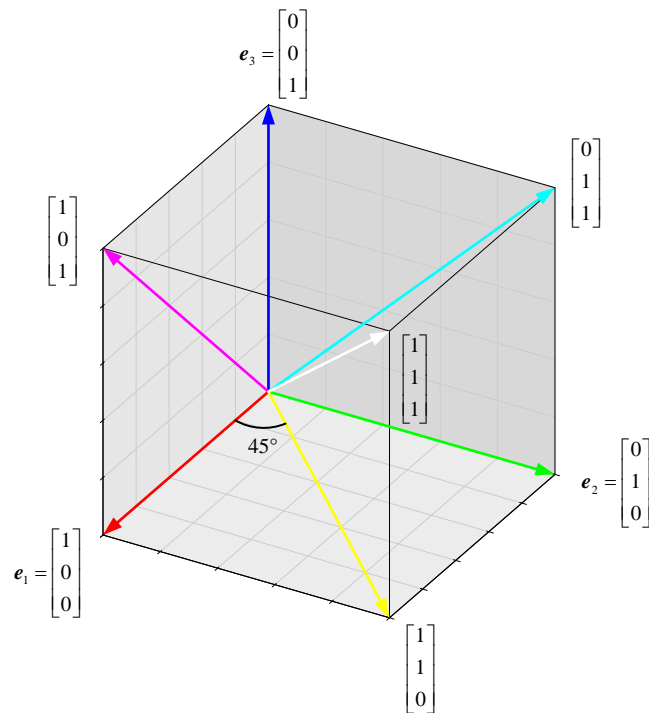


图 6. RGB 空间中颜色向量夹角 45 度

如图 7 所示，RGB 空间中黄色、品红、青色构成正四边形。正四边形每个面都是等边三角形。

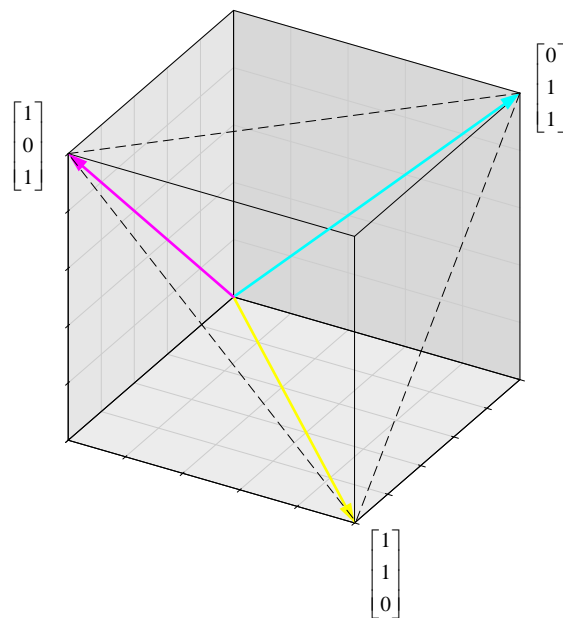


图 7. RGB 空间中黄色、品红、青色构成正四边形

下面再计算黄色向量 $e_1 + e_2$ 、青色向量 $e_2 + e_3$ 的向量内积

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = 1 \quad (14)$$

黄色向量、青色向量夹角余弦值为

$$\frac{1}{\sqrt{1^2+1^2+0^2} \times \sqrt{0^2+1^2+1^2}} = \frac{1}{2} \quad (15)$$

黄色向量、青色向量的夹角为

$$\arccos\left(\frac{1}{2}\right) = 60^\circ \quad (16)$$

请大家思考图 6 中还有哪些向量之间夹角为 60° 。

下面，让我们算一下白色向量 $e_1 + e_2 + e_3$ 、红色向量 e_1 的内积

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 1 \quad (17)$$

白色向量、红色向量夹角余弦值为

$$\frac{1}{\sqrt{1^2+1^2+1^2} \times \sqrt{1^2+0^2+0^2}} = \frac{\sqrt{3}}{3} \quad (18)$$

白色向量、红色向量的夹角为

$$\arccos\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) \approx 54.8^\circ \quad (19)$$

请大家自行计算，白色向量、绿色向量之间的夹角。

再算一下白色向量 $e_1 + e_2 + e_3$ 、黄向量 $e_1 + e_2$ 的内积

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 2 \quad (20)$$

白色向量、黄色向量夹角余弦值为

$$\frac{2}{\sqrt{1^2+1^2+1^2} \times \sqrt{1^2+1^2+0^2}} = \frac{\sqrt{6}}{3} \quad (21)$$

白色向量、黄色向量的夹角为

$$\arccos\left(\frac{\sqrt{6}}{3}\right) \approx 35.3^\circ \quad (22)$$

请大家自行计算，白色向量、青色向量之间的夹角。

颜色向量夹角大于 0° 、小于 90° ，意味着两个颜色存在成分上的重叠，即“你中有我，我中有你”；如果夹角为 90° 意味着两种颜色向量正交，没有重叠的成分。

如图 8 所示，夹角越接近 0 度，说明两个颜色向量的方向越相似，表示颜色更接近，重叠程度越高；夹角越接近 90 度，说明两个颜色向量的方向差异越大，表示颜色区分度更高，重叠程度越低。

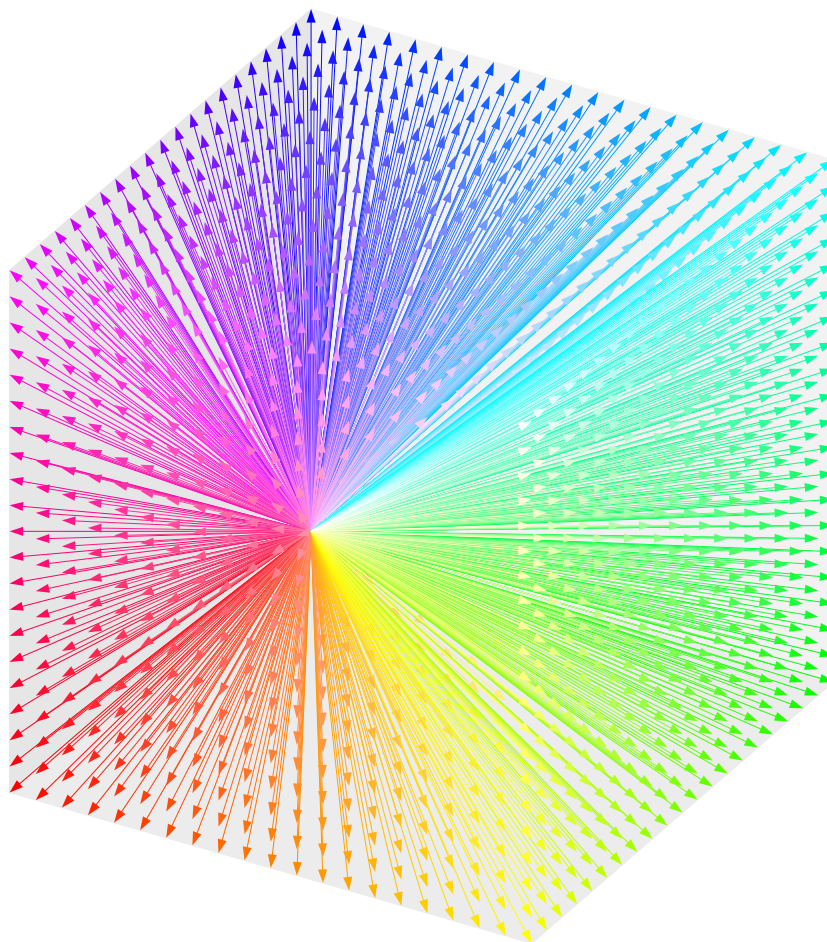


图 8. 颜色向量夹角越接近 0 度，两个颜色越相似

极坐标中看向量内积

上一节介绍的极坐标在推导向量内积时提供了一个直观的几何解释。我们可以利用极坐标表示向量，并基于三角函数关系导出内积公式。

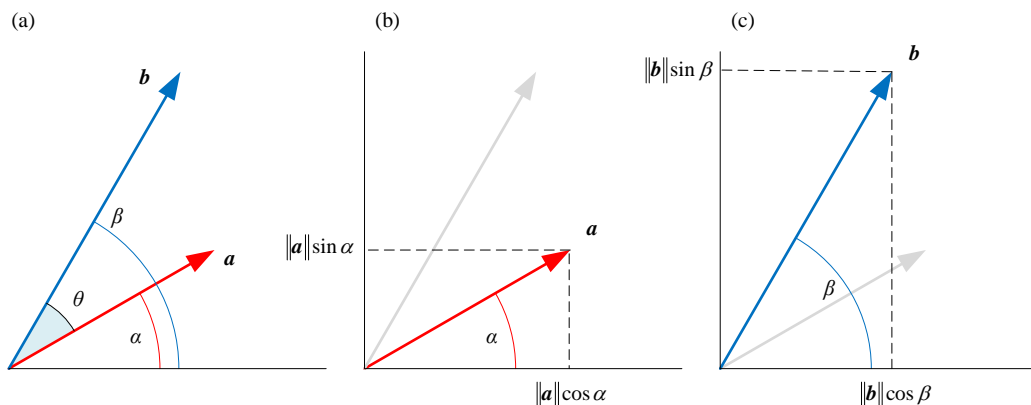
图 9 (a) 所示的极坐标中， \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 两个向量的极坐标可以写成 $(\|\mathbf{a}\|, \alpha)$ 、 $(\|\mathbf{b}\|, \beta)$ 。

α 为 \mathbf{a} 和极轴 (x_1 正方向) 夹角， β 为 \mathbf{b} 和极轴夹角。

如图 9 (a) 所示， \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 夹角为 $\theta = \beta - \alpha$ 。

根据三角恒等式， \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 夹角的余弦值可以展开写成

$$\cos \theta = \cos(\beta - \alpha) = \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta \quad (23)$$

图 9. 极坐标、直角坐标系中看向量 a 、 b

在直角坐标系中，如图 9 (b)，向量 a 对应的坐标为 $(\|a\|\cos \alpha, \|a\|\sin \alpha)$ ；如图 9 (c)，向量 b 对应的坐标为 $(\|b\|\cos \beta, \|b\|\sin \beta)$ 。

根据本章前文内容， a 、 b 可以写成“长度 \times 方向向量”

$$a = \|a\| \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix}, \quad b = \|b\| \begin{bmatrix} \cos \beta \\ \sin \beta \end{bmatrix} \quad (24)$$

a 、 b 的内积为

$$\begin{aligned} a \cdot b &= \|a\| \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix} \cdot \|b\| \begin{bmatrix} \cos \beta \\ \sin \beta \end{bmatrix} \\ &= \|a\| \|b\| \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \cos \beta \\ \sin \beta \end{bmatrix} \\ &= \|a\| \|b\| (\cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) \\ &= \|a\| \|b\| \cos(\beta - \alpha) = \|a\| \|b\| \cos \theta \end{aligned} \quad (25)$$

余弦定理

我们也可以利用三角形余弦定理来推导向量内积的公式。

如图 10 (b) 所示，几何上，三角形余弦定理为

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab \cos \theta \quad (26)$$

三角形边长 a 、 b 、 c 分别对应向量 a 、 b 、 c 长度。

上式可以写成

$$\|c\|^2 = \|a\|^2 + \|b\|^2 - 2\|a\|\|b\|\cos \theta \quad (27)$$

如图 10 (a) 所示，引入向量差 $c = a - b$ ，向量 c 的长度的平方为

$$\begin{aligned}
 \|c\|^2 &= \|a-b\|^2 \\
 &= (a-b) \cdot (a-b) \\
 &= a \cdot a + b \cdot b - 2a \cdot b \\
 &= \|a\|^2 + \|b\|^2 - 2a \cdot b
 \end{aligned} \tag{28}$$

比较上两式，容易得到 $\|a\|\|b\|\cos\theta = a \cdot b$ 。

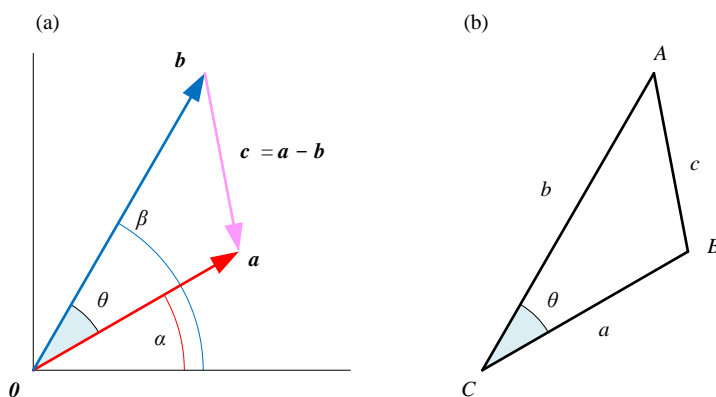


图 10. 余弦定理和向量内积



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

Q1. 请计算如下成对向量的内积、夹角，并解释几何意义。

- ▶ $[1, 0]^T, [0, 1]^T$;
- ▶ $[-1, 0]^T, [0, -1]^T$;
- ▶ $[1, 0]^T, [-1, 0]^T$;
- ▶ $[3, 4]^T, [-4, 3]^T$;

Q2. 给定 $x = [x_1, x_2]^T$ 和 $[1, 1]^T$ 正交，求满足条件的 x_1, x_2 关系式，并试着描述这个关系式在几何上代表什么？

Q3. 给定 $x = [x_1, x_2, x_3]^T$ 和 $[1, 1, 1]^T$ 正交，求满足条件的 x_1, x_2, x_3 关系式，并试着描述这个关系式在几何上代表什么？

Q4. 请写 Python 代码完成图 6 中成对向量内积、夹角余弦值、夹角计算。

Q5. 用 Python 生成两个三维随机整数向量，要求向量的分量为 $[0, 9]$ 范围内的整数，计算并输出这两个向量的点积、夹角。

Q6. 请自学如何计算向量外积。

<https://mathworld.wolfram.com/CrossProduct.html>

Q7. 请自学余弦相似性 (cosine similarity)。

Q8. 请预习标量投影、向量投影。

Q9. 请自学向量逐项积 (Hadamard product, element-wise product)。