2022 年 08 月 19 日

正規確率変数の一次式の独立性

新潟工科大学 基礎教育・教養系 竹野茂治

1 はじめに

本稿では、正規分布に従う独立な n 個の確率変数 $x_1,\ldots,x_n$ の一次式として作った m 個の確率変数

$$y_i=\sum_{j=1}^n a_{i,j}x_j+b_i\quad (1\leq i\leq m,\ a_{ij},b_i\text{: 定数})\tag{1}$$

が、どのような場合に独立となるのかについて考察する。

なお、本稿では現代的な公理的確率論ではなく、古典的確率論の範疇で考える。

2 標準化と独立性

各確率変数 x_j $(1\leq j\leq n)$ は正規分布に従うが、それぞれの平均と分散は違っていてもよいとする。すなわち、

$$x_j\sim N(\mu_j,\sigma_j^2)\quad (\sigma_j>0)\tag{2}$$

であるとするが、先にこれを標準化する。

$$u_j=\frac{x_j-\mu_j}{\sigma_j}\sim N(0,1)\tag{3}$$

となるので、これを使って $\overrightarrow{y}$ を表す。(1) を行列化し、

$$\overrightarrow{y}=A\overrightarrow{x}+\overrightarrow{b},\quad A=[a_{i,j}]_{m,n},\ \ \overrightarrow{y}=\begin{bmatrix}y_1\\ \vdots\\ y_m\end{bmatrix},\ \ \overrightarrow{x}=\begin{bmatrix}x_1\\ \vdots\\ x_n\end{bmatrix},\ \ \overrightarrow{b}=\begin{bmatrix}b_1\\ \vdots\\ b_m\end{bmatrix}\tag{4}$$

とする。一般に $\ell \times k$ 行列 C, ℓ 次元列ベクトル $\overrightarrow{p}$, k 次元列ベクトル $\overrightarrow{q}$

$$C = [c_{i,j}]_{\ell,k} = \begin{bmatrix} \vec{\overrightarrow{c}}_1 \\ \vdots \\ \vec{\overrightarrow{c}}_\ell \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overrightarrow{c}_1 & \cdots & \overrightarrow{c}_k \end{bmatrix}, \quad \overrightarrow{p} = \begin{bmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_\ell \end{bmatrix}, \quad \overrightarrow{q} = \begin{bmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_k \end{bmatrix},$$

に対して、

$$C \otimes \overrightarrow{p} = \begin{bmatrix} p_1 \vec{\overrightarrow{c}}_1 \\ \vdots \\ p_\ell \vec{\overrightarrow{c}}_\ell \end{bmatrix}, \quad C \oplus \overrightarrow{q} = \begin{bmatrix} q_1 \overrightarrow{c}_1 & \cdots & q_k \overrightarrow{c}_k \end{bmatrix} \tag{5}$$

と書くことにすれば、(3) より $x_j = \sigma_j u_j + \mu_j$ は

$$\overrightarrow{x} = \overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{\sigma} + \overrightarrow{\mu}, \quad \overrightarrow{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_n \end{bmatrix}, \quad \overrightarrow{\mu} = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_n \end{bmatrix}$$

となり、これにより、$\overrightarrow{y}$ は

$$\overrightarrow{y} = A\overrightarrow{x} + \overrightarrow{b} = A(\overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{\sigma}) + A\overrightarrow{\mu} + \overrightarrow{b}$$

と書けるが、

$$A = \begin{bmatrix} \vec{\overrightarrow{\alpha}}_1 \\ \vdots \\ \vec{\overrightarrow{\alpha}}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overrightarrow{\alpha}_1 & \cdots & \overrightarrow{\alpha}_n \end{bmatrix} \tag{6}$$

とすると、

$$\begin{aligned} A(\overrightarrow{u} \otimes \overrightarrow{\sigma}) &= \begin{bmatrix} \overrightarrow{\alpha}_1 & \cdots & \overrightarrow{\alpha}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 u_1 \\ \vdots \\ \sigma_n u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \overrightarrow{\alpha}_1 & \cdots & \sigma_n \overrightarrow{\alpha}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \\ &= (A \oplus \overrightarrow{\sigma})\overrightarrow{u} \end{aligned}$$

となるので、$\overrightarrow{y}$ は

$$\overrightarrow{y} = (A \oplus \overrightarrow{\sigma})\overrightarrow{u} + \overrightarrow{b}', \quad \overrightarrow{b}' = A\overrightarrow{\mu} + \overrightarrow{b} \tag{7}$$

と $\overrightarrow{u}$ の一次式として表されることになる。

u_j は x_j の一次式なので、$x_1,\ldots,x_n$ が独立なら $u_1,\ldots,u_n$ も ($(x_1,\ldots,x_n)$ の n 次元分布に関して) 独立で、逆に $u_1,\ldots,u_n$ が独立なら、$x_1,\ldots,x_n$ も ($(u_1,\ldots,u_n)$ の n 次元分布に関して) 独立となる ([1])。よって、元の問題は、$\mu_j=0,\,\sigma_j=1$ の標準正規分布に関して独立性の判定ができれば、一般の正規分布の場合でも (7) の形にしてから標準正規分布に関して判定を行えばよいことになる。よって、以後は $\mu_j=0,\,\sigma_j=1$ $(1\leq j\leq n)$ とする。

一般に、連続確率変数 $x_1,\ldots,x_n$ が独立であるとは、n 次元確率変数 $(x_1,\ldots,x_n)$ の密度関数 $f(\overrightarrow{x})=f(x_1,\ldots,x_n)$ が、各 x_j の密度関数 $f_j(x_j)$ を用いて

$$f(\overrightarrow{x})=f_1(x_1)\cdots f_n(x_n)$$

となることであるが ([1])、これは、任意の $t_1,\ldots,t_n\in\mathrm{R}$ に対して、同時確率が

$$\mathrm{Prob}\{x_1\leq t_1,\ldots,x_n\leq t_n\}=\mathrm{Prob}\{x_1\leq t_1\}\times\cdots\times\mathrm{Prob}\{x_n\leq t_n\} \tag{8}$$

のように各 x_j に対する確率の積で表される、と言い変えることもできる。

本稿では、上で見たように $x_j\sim N(0,1)$ としてよいので、$f_j(x_j)=e^{-x_j^2/2}/\sqrt{2\pi}$ より、$f(\overrightarrow{x})$ は

$$f(\overrightarrow{x})=\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n e^{-|\overrightarrow{x}|^2/2},\quad |\overrightarrow{x}|^2=x_1^2+\cdots+x_n^2 \tag{9}$$

となる。この条件の元で、

$$\mathrm{Prob}\{y_1\leq t_1,\ldots,y_m\leq t_m\}=\mathrm{Prob}\{y_1\leq t_1\}\times\cdots\times\mathrm{Prob}\{y_m\leq t_m\} \tag{10}$$

となるかどうか、そしてそうなるための条件を考えることが本稿の目標となる。

3 正則変換の場合

本節以降で、A に関する場合分けをして考えていく。本節では、まず $n=m$ で A が正則、すなわち $B=A^{-1}$ が存在する場合を考える。

この場合、(4) は、

$$\overrightarrow{x} = B\overrightarrow{y} + \overrightarrow{c}, \quad \overrightarrow{c} = -B\overrightarrow{b} \tag{11}$$

と変形できる。

$(y_1, \ldots, y_n)$ の分布関数 $G(\overrightarrow{y}) = G(y_1, \ldots, y_n)$ は、

$$G(t_1, \ldots, t_n) = \mathrm{Prob}\{y_1 \leq t_1, \ldots, y_n \leq t_n\} \tag{12}$$

と定義されるが、$y_i = \overrightarrow{\alpha}_i \overrightarrow{x} + b_i$、および $\overrightarrow{x}$ の密度関数 $f(\overrightarrow{x})$ を用いてこれは、

$$G(t_1, \ldots, t_n) = \int_{H(\overrightarrow{t})} f(\overrightarrow{x}) d\overrightarrow{x}, \quad H(\overrightarrow{t}) = \{\overrightarrow{x} \mid \overrightarrow{\alpha}_i \overrightarrow{x} + b_i \leq t_i \ (1 \leq i \leq n)\} \tag{13}$$

の形に書くことができる。この積分を (11) で変数変換すると、そのヤコビ行列式は、

$$J = \left|\frac{\partial \overrightarrow{x}}{\partial \overrightarrow{y}}\right| = |B| = \frac{1}{|A|}$$

となるので、

$$\begin{aligned} G(t_1, \ldots, t_n) &= \mathrm{abs}(|B|) \int_{L(\overrightarrow{t})} f(B\overrightarrow{y} + \overrightarrow{c}) d\overrightarrow{y} \\ &= \mathrm{abs}(|B|) \int_{-\infty}^{t_1} dy_1 \cdots \int_{-\infty}^{t_n} f(B\overrightarrow{y} + \overrightarrow{c}) dy_n \\ &\quad \big(L(\overrightarrow{t}) = \{\overrightarrow{y} \mid y_i \leq t_i \ (1 \leq j \leq n)\}\big) \end{aligned}$$

となる。なお、$\mathrm{abs}(x)$ は x の絶対値とする。$G(\overrightarrow{y})$ を $y_1, \ldots, y_n$ で微分したものが $(y_1, \ldots, y_n)$ の密度関数 $g(\overrightarrow{y})$ となるので、

$$g(\overrightarrow{y}) = \mathrm{abs}(|B|) f(B\overrightarrow{y} + \overrightarrow{c}) \tag{14}$$

となる。よって、$y_1, \ldots, y_n$ が独立であることは、この $g(\overrightarrow{y})$ が、各 y_j の関数の積に書けることと同値になる。

(9) より、

$$g(\overrightarrow{y}) = \mathrm{abs}(|B|) f(B\overrightarrow{y} + \overrightarrow{c}) = \frac{\mathrm{abs}(|B|)}{(\sqrt{2\pi})^n} e^{-|B\overrightarrow{y} + \overrightarrow{c}|^2/2} \tag{15}$$

となるが、

$$\begin{aligned}|B\vec{y}+\vec{c}|^2 &= \left|\begin{bmatrix}\vec{\beta}_1 & \cdots & \vec{\beta}_n\end{bmatrix}\vec{y}+\vec{c}\right|^2 = \left|\sum_{i=1}^{n}\vec{\beta}_j y_j+\vec{c}\right|^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} d_i y_i^2 + 2\sum_{1\le i<j\le n} p_{i,j}y_iy_j + 2\sum_{i=1}^{n} r_iy_i + c, \qquad (16)\\ & \quad d_i=|\vec{\beta}_i|^2,\ p_{i,j}=\vec{\beta}_i\cdot\vec{\beta}_j,\ r_i=\vec{\beta}_i\cdot\vec{c},\ c=|\vec{c}|^2\end{aligned}$$

となるので、密度関数 (15) が各 y_j の関数の積になることは、$1\le i<j\le n$ となるすべての i,j に対して y_iy_j の係数 $p_{i,j}$ が 0 になることと同値になる。そしてそれは、$p_{i,j}=\vec{\beta}_i\cdot\vec{\beta}_j$ より、$B=A^{-1}$ の列ベクトル $\vec{\beta}_1,\ldots,\vec{\beta}_n$ が互いに垂直であることを意味する。この場合はこれが $y_1,\ldots,y_n$ の独立性の条件となる。

この B の列ベクトル $\vec{\beta}_j$ に関する条件を、元の行列 A に関する条件に書き直す。

命題 1

$n\times n$ 行列 P が $|P|\neq 0$ で、その逆行列を $Q=P^{-1}$ とし、

$$P=\begin{bmatrix}\vec{p}_1\\ \vdots\\ \vec{p}_n\end{bmatrix},\quad Q=\begin{bmatrix}\vec{q}_1 & \cdots & \vec{q}_n\end{bmatrix}$$

とするとき、$\vec{q}_1,\ldots\vec{q}_n$ が互いに垂直であることと、$\vec{p}_1,\ldots\vec{p}_n$ が互いに垂直であることは同値。

証明

$PQ=\left[\vec{p}_i\vec{q}_j\right]_{n,n}=E$ より $\vec{p}_i\vec{q}_j=\delta_{i,j}$ となるから、${}^t\vec{p}_i$ は $\vec{q}_i$ 以外の $\vec{q}_j$ すべてに垂直、${}^t\vec{q}_j$ は $\vec{p}_j$ 以外の $\vec{p}_i$ すべてに垂直、となる。

よって、今 $\vec{q}_1,\ldots\vec{q}_n$ が互いに垂直であるとすると、${}^t\vec{p}_i \,/\!/\, \vec{q}_i$ となり、${}^t\vec{p}_i=c_i\vec{q}_i$ と書け、

$$\vec{p}_i\vec{q}_i=c_i{}^t\vec{q}_i\vec{q}_i=c_i|\vec{q}_i|^2=1$$

より $c_i=1/|\vec{q}_i|^2$ となる。よって、$\vec{p}_i={}^t\vec{q}_i/|\vec{q}_i|^2$ $(1\le i\le n)$ は互いに垂直となる。逆も同様。■

この命題 1 より、B の列ベクトルの垂直性は A の行ベクトルの垂直性と同値になる。結局、A が正則な場合は、$y_1, \ldots, y_n$ が独立であることは、A の行ベクトル $\overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_n$ が互いに垂直であることが条件となる。

例えば、$n = 2$ の場合、$x_1, x_2 \sim N(0, 1)$ が独立であり、$y_1 = ax_1 + bx_2, y_2 = cx_1 + dx_2$ で $ad - bc \neq 0$ の場合、y_1, y_2 が独立であることは、$ac + bd = 0$ と同値となるので、$y_1 = x_1 + x_2$ と $y_2 = x_1 - x_2$ は独立、$y_1 = 2x_1 + 3x_2$ と $y_2 = 3x_1 - 2x_2$ は独立だが、$y_1 = x_1$ と $y_2 = x_1 + x_2$ は独立ではない。

4 行ベクトルが線形従属の場合

次は、A の行ベクトル $\overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_m$ が線形従属の場合を考える。結論から言えば、この場合は $y_1, \ldots, y_m$ は独立にはならない。本節はそのこと、すなわち (10) が成り立つとして矛盾を示す。

まず、すべての i に対し $\overrightarrow{\alpha}_i \neq \overrightarrow{0}$ としてよいことを示す。それは、もしある i に対して $\overrightarrow{\alpha}_i = \overrightarrow{0}$ ならば $y_i = b_i$ (定数) となるから、$\mathrm{Prob}\{y_i = b_i\} = 1$ となって y_i が連続確率変数ではないことになるからである。

$\langle V \rangle$ を V のベクトルが張るベクトル空間、すなわち V の有限個のベクトルの線形結合の全体 (V を含む最小の部分空間) とする。$V_1 = \langle \overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_m \rangle$ の次元を $\ell = \dim V_1$ とすると、線形従属の仮定から $\ell < m$ で、$\overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_m$ から線形独立な ℓ 個のベクトルを取ることができる。y_i の添字の順序を変えることで、その ℓ 個のベクトルを $\overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_\ell$ とすることができ、残りの $\overrightarrow{\alpha}_i$ $(\ell < i \leq m)$ はすべて $\overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_\ell$ の線形結合として書ける、すなわち

$$\overrightarrow{\alpha}_i \in \langle \overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_\ell \rangle \quad (\ell < i \leq m) \tag{17}$$

となる。(17) より、例えば $\overrightarrow{\alpha}_{\ell+1}$ は、

$$\overrightarrow{\alpha}_{\ell+1} = \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \overrightarrow{\alpha}_i \quad (\xi_1, \ldots, \xi_\ell) \neq (0, \ldots, 0) \tag{18}$$

の形に書ける。

まず、(10) が成り立つとき、その $y_i \leq t_i$ のいくつかを $y_i > t_i$ に変えることができることに注意する。例えば (10) で $t_m \to \infty$ とすると

$$\mathrm{Prob}\{y_1 \leq t_1, \ldots, y_{m-1} \leq t_{m-1}\}$$

$$= \quad \mathrm{Prob}\{y_1 \le t_1\} \times \cdots \times \mathrm{Prob}\{y_{m-1} \le t_{m-1}\} \tag{19}$$

となり、(19) から (10) を引けば、

$$\begin{aligned}&\mathrm{Prob}\{y_1 \le t_1, \ldots, y_{m-1} \le t_{m-1}, y_m > t_m\}\\ &\quad = \quad \mathrm{Prob}\{y_1 \le t_1\} \times \cdots \times \mathrm{Prob}\{y_{m-1} \le t_{m-1}\} \times \mathrm{Prob}\{y_m > t_m\}\end{aligned} \tag{20}$$

となる。

(18) の係数の ξ_i を正のもの、負のもの、0 のものに分類する。$y_1, \ldots, y_\ell$ の順序を交換すれば、ξ_i の順序が変わるので、

$$\xi_i < 0 \ \ (i \le k_1), \quad \xi_i > 0 \ \ (k_1 < i \le k_2), \quad \xi_i = 0 \ \ (k_2 < i \le \ell) \tag{21}$$

となるようにする。ただし、ξ_i はすべてが 0 にはならないから、$1 \le k_2 \le \ell$ である。

これに合わせて、(10) の不等式のうち $i \le k_1$ の部分を逆向きに変え、さらに $k_2 < i \le \ell$ の部分、および $\ell + 1 < i \le m$ の部分は $t_i \to \infty$ とすることでその不等式を消して、

$$\begin{aligned}&\mathrm{Prob}\{y_1 > t_1, \ldots, y_{k_1} > t_{k_1}, y_{k_1+1} \le t_{k_1+1}, \ldots, y_{k_2} \le t_{k_2}, y_{\ell+1} \le t_{\ell+1}\}\\ &\quad = \quad \mathrm{Prob}\{y_1 > t_1\} \times \cdots \times \mathrm{Prob}\{y_{k_1} > t_{k_1}\}\\ &\qquad\quad \times \mathrm{Prob}\{y_{k_1+1} \le t_{k_1+1}\} \times \cdots \times \mathrm{Prob}\{y_{k_2} \le t_{k_2}\} \times \mathrm{Prob}\{y_{\ell+1} \le t_{\ell+1}\}\end{aligned} \tag{22}$$

とする。(18) より、

$$\begin{aligned} y_{\ell+1} &= \overrightarrow{\alpha}_{\ell+1}\overrightarrow{x} + b_{\ell+1} = \sum_{i=1}^{\ell} \xi_i \overrightarrow{\alpha}_i \overrightarrow{x} + b_{\ell+1} = \sum_{i=1}^{k_2} \xi_i (y_i - b_i) + b_{\ell+1}\\ &= \sum_{i=1}^{k_2} \xi_i y_i + b_0 \quad \left(b_0 = b_{\ell+1} - \sum_{i=1}^{k_2} \xi_i b_i \right)\end{aligned} \tag{23}$$

となる。よって、$t_1, \ldots, t_{k_2}, t_{\ell+1}$ を、

$$\sum_{i=1}^{k_2} \xi_i t_i + b_0 \le t_{\ell+1} \tag{24}$$

を満たすように取ると、

$$y_1 > t_1, \ldots, y_{k_1} > t_{k_1}, y_{k_1+1} \leq t_{k_1+1}, \ldots, y_{k_2} \leq t_{k_2}$$

と、(23), (24) から自然に $y_{\ell+1} \leq t_{\ell+1}$ が従う。よって、(24) の場合、(22) の左辺からは $y_{\ell+1}$ に関するものが消える。$y_1, \ldots, y_m$ の独立性の仮定から、その左辺は $y_1, \ldots, y_{k_2}$ に関する確率の積となり、よって

$$\begin{aligned} & \mathrm{Prob}\{y_1 > t_1\} \times \cdots \times \mathrm{Prob}\{y_{k_2} \leq t_{k_2}\} \\ = \; & \mathrm{Prob}\{y_1 > t_1\} \times \cdots \times \mathrm{Prob}\{y_{k_2} \leq t_{k_2}\} \times \mathrm{Prob}\{y_{\ell+1} \leq t_{\ell+1}\} \end{aligned}$$

となり、各 y_i は正規分布に従うのでこれらはいずれも 0 ではなく、よって

$$\mathrm{Prob}\{y_{\ell+1} \leq t_{\ell+1}\} = 1$$

が成り立つことになり、これは $\vec{\alpha}_{\ell+1} \neq \vec{0}$ では起こりえないので矛盾となる。

結果として、A の行ベクトルが線形従属の場合は、$y_1, \ldots, y_m$ は独立にはならないことが示された。

5 行ベクトルが線形独立で正方行列でない場合

あとは考えるべきは、A の行ベクトルが線形独立で、かつ A が正方行列でない場合、すなわち $n \neq m$ の場合となる。$n < m$ ならば A の行ベクトルは必ず線形従属となるので、$n > m$ の場合のみを考えればよい。

本節以降で、これをいくつかの段階に分けて、補題などを紹介しながら考えていくことにする。

n 次元行ベクトル $\vec{\alpha}_1, \ldots, \vec{\alpha}_m$ が線形独立なので、これに $(n-m)$ 個の線形独立なベクトル $\vec{\alpha}_{m+1}, \ldots, \vec{\alpha}_n$ を追加して、$\vec{\alpha}_1, \ldots, \vec{\alpha}_n$ が線形独立であるようにできる。

その上で

$$y_j = \vec{\alpha}_j \vec{x} \quad (m < j \leq n) \tag{25}$$

とすれば、n 個の確率変数 $y_1, \ldots, y_n$ を作ることができる。そして、

$$\overrightarrow{y}' = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad A' = \begin{bmatrix} \overrightarrow{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \overrightarrow{\alpha}_n \end{bmatrix}, \quad \overrightarrow{b}' = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{26}$$

とし、

$$B = (A')^{-1} = \begin{bmatrix} \overrightarrow{\beta}_1 & \cdots & \overrightarrow{\beta}_n \end{bmatrix}, \quad \overrightarrow{c} = -B\overrightarrow{b}' \tag{27}$$

とする。

考えるのは、$y_1, \ldots, y_m$ の独立性、すなわち (10) であるが、その左辺が m 次元確率分布 $(y_1, \ldots, y_m)$ の分布関数 $G(t_1, \ldots, t_m)$ で、それを積分で書いて $\overrightarrow{x}$ から $\overrightarrow{y}$ に変数変換すれば、

$$\begin{aligned} G(t_1, \ldots, t_m) &= \int_{\{\overrightarrow{x} \mid y_i \le t_i \ (1 \le i \le m)\}} f(\overrightarrow{x}) d\overrightarrow{x} \\ &= \int_{-\infty}^{t_1} dy_1 \cdots \int_{-\infty}^{t_m} dy_m \int_{\mathrm{R}^{n-m}} f(B\overrightarrow{y}' + \overrightarrow{c}) \, \mathrm{abs}(|B|) dy_{m+1} \cdots dy_n \end{aligned}$$

となり、よって密度関数 $g(y_1, \ldots, y_m)$ はこれを微分して、

$$g(y_1, \ldots, y_m) = \mathrm{abs}(|B|) \int_{\mathrm{R}^{n-m}} f(B\overrightarrow{y}' + \overrightarrow{c}) dy_{m+1} \cdots dy_n \tag{28}$$

となる。あとは、これが $g_1(y_1) \cdots g_m(y_m)$ の形になるかどうかを考えればよい。ここで、$x_1, \ldots x_n$ の独立性より、$f(\overrightarrow{x})$ は (9) の形なので、ここに $\overrightarrow{x} = B\overrightarrow{y} + \overrightarrow{c}$ を代入すると、指数部分は、(16) 同様

$$\begin{aligned} |\overrightarrow{x}|^2 &= |B\overrightarrow{y}' + \overrightarrow{c}|^2 = \left| \sum_{i=1}^{n} \overrightarrow{\beta}_j y_j + \overrightarrow{c} \right|^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} d_i y_i^2 + 2 \sum_{1 \le i < j \le n} p_{i,j} y_i y_j + 2 \sum_{i=1}^{n} r_i y_i + c \\ & \qquad (d_i = |\overrightarrow{\beta}_i|^2, \ p_{i,j} = \overrightarrow{\beta}_i \cdot \overrightarrow{\beta}_j, \ r_i = \overrightarrow{\beta}_i \cdot \overrightarrow{c}, \ c = |\overrightarrow{c}|^2) \end{aligned} \tag{29}$$

となる。$\overrightarrow{\beta}_1, \ldots, \overrightarrow{\beta}_n$ は線形独立なので、$d_i > 0$ $(1 \le i \le n)$ で、よってこれを (9) に代入して、(28) の積分を計算すると、最終的に、

$$\begin{aligned} g(y_1, \ldots, y_m) &= a_0 e^{-h_0(y_1,\ldots,y_m)/2}, \\ h_0(y_1, \ldots, y_m) &= \sum_{i=1}^{m} d_i^{(0)} y_i^2 + 2 \sum_{i<j\le m} p_{i,j}^{(0)} y_i y_j + 2 \sum_{i=1}^{m} r_i^{(0)} y_i + c^{(0)} \end{aligned}$$

のような形になる。これにより、$y_1, \ldots, y_m$ の独立性の条件は、$y_i y_j$ の係数 $p_{i,j}^{(0)}$ がすべて 0 になること、になる。

以後は、この $p_{i,j}^{(0)}$ を具体的に求めること、およびそれが 0 であるという条件を元の A の条件に書き直すこと、が目標となる。

6 漸化式

(28) の積分は、すべて R 上の積分なので、その積分は、(29) の $y_n, y_{n-1}, \ldots, y_{m+1}$ に関する平方完成の計算に帰着される。それを計算するために、係数、特に $\overrightarrow{y}'$ の 2 次の項の係数に対する漸化式を作る。

まず、(29) を y_n に関して平方完成してみる。$d_n = |\overrightarrow{\beta}_n|^2 > 0$ であることに注意する。(29) の右辺を $h_n(y_1, \ldots, y_n)$ と書くことにすると、そこに含まれる y_n に関する項は

$$\begin{aligned} & d_n y_n^2 + 2 \sum_{i=1}^{n-1} p_{i,n} y_i y_n + 2 r_n y_n \\ &= d_n \left(y_n + \frac{1}{d_n} \sum_{i=1}^{n-1} p_{i,n} y_i + \frac{r_n}{d_n} \right)^2 - \frac{1}{d_n} \left(\sum_{i=1}^{n-1} p_{i,n} y_i + r_n \right)^2 \end{aligned}$$

のようになり、この右辺の最後の項が y_n での積分後に残って、$y_1, \ldots, y_{n-1}$ の項として追加されることになる。よって、h_n のうち y_n の平方部分を除いたものを $h_{n-1}(y_1, \ldots, y_{n-1})$ とすると、

$$h_n(y_1, \ldots, y_n) = d_n \left(y_n + \frac{1}{d_n} \sum_{i=1}^{n-1} p_{i,n} y_i + \frac{r_n}{d_n} \right)^2 + h_{n-1}(y_1, \ldots, y_{n-1})$$

で、h_{n-1} は、

$$\begin{aligned}
&h_{n-1}(y_1,\ldots,y_{n-1})\\
&= \sum_{1\le i\le n-1}\left(d_i-\frac{p_{i,n}^2}{d_n}\right)y_i^2+2\sum_{1\le i<j\le n-1}\left(p_{i,j}-\frac{p_{i,n}p_{j,n}}{d_n}\right)y_iy_j\\
&\quad +2\sum_{1\le i\le n-1}\left(r_i-\frac{r_np_{i,n}}{d_n}\right)y_i+c-\frac{r_n^2}{d_n}
\end{aligned}\tag{30}$$

となり、y_n での積分は y_n の平方完成部分の積分が

$$\int_{\mathrm{R}} e^{-d_n(y_n+\gamma)^2/2}dy_n=\sqrt{\frac{\pi}{d_n}}$$

と定数になり、指数には h_{n-1} だけが残る。次は h_{n-1} を y_{n-1} に関して平方完成を行う、という計算になる。この平方完成部分以外の項 $h_k(y_1,\ldots,y_k)$ の係数に関する漸化式を作る。

$$h_k(y_1,\ldots,y_k)=\sum_{i=1}^k d_i^{(k)}y_i^2+2\sum_{1\le i<j\le k}p_{i,j}^{(k)}y_iy_j+2\sum_{i=1}^k r_i^{(k)}y_i+c^{(k)}\tag{31}$$

とすると $(m\le k\le n)$、$k=n$ に対しては、

$$\begin{aligned}
&d_i^{(n)}=d_i=|\overrightarrow{\beta}_i|^2,\quad p_{i,j}^{(n)}=p_{i,j}=\overrightarrow{\beta}_i\cdot\overrightarrow{\beta}_j,\quad r_i^{(n)}=r_i=\overrightarrow{\beta}_i\cdot\overrightarrow{c},\\
&c^{(n)}=c=|\overrightarrow{c}|^2
\end{aligned}\tag{32}$$

で、$d_k^{(k)}>0$ であれば上の計算と同様に、

$$h_k(y_1,\ldots,y_k)=d_k^{(k)}\left(y_k+\frac{1}{d_k^{(k)}}\sum_{1\le i<k}p_{i,k}^{(k)}y_i+\frac{r_k^{(k)}}{d_k^{(k)}}\right)^2+h_{k-1}(y_1,\ldots,y_{k-1})\tag{33}$$

となり $(m+1\le k\le n)$、h_{k-1} の係数は、(30) と同様に、

$$d_i^{(k-1)} = d_i^{(k)}-\frac{(p_{i,k}^{(k)})^2}{d_k^{(k)}}\quad(1\le i<k),\tag{34}$$

$$p_{i,j}^{(k-1)} = p_{i,j}^{(k)}-\frac{p_{i,k}^{(k)}p_{j,k}^{(k)}}{d_k^{(k)}}\quad(1\le i<j<k),\tag{35}$$

$$r_i^{(k-1)} = r_i^{(k)}-\frac{r_k^{(k)}p_{i,k}^{(k)}}{d_k^{(k)}}\quad(1\le i<k),\quad c^{(k-1)} = c^{(k)}-\frac{(r_k^{(k)})^2}{d_k^{(k)}}\tag{36}$$

となり、これらが係数に関する (k に関して逆向きの) 漸化式となる。なお、

$$p_{i,i}^{(k)} = d_i^{(k)} \ \ (1 \leq i \leq k), \quad p_{j,i}^{(k)} = p_{i,j}^{(k)} \ \ (1 \leq i < j \leq k) \tag{37}$$

と定義すると、$k = n$ に対しては自然に $p_{i,i}^{(n)} = p_{i,i} = d_i = |\overrightarrow{\beta}_i|^2$、$p_{j,i}^{(n)} = p_{j,i} = \overrightarrow{\beta}_j \cdot \overrightarrow{\beta}_i$ となり、$d_i^{(k)}$ に関する漸化式 (34) は $i = j$ に対する (35) に含まれることになるから、(35) は、

$$p_{i,j}^{(k-1)} = \frac{1}{p_{k,k}^{(k)}} \left(p_{i,j}^{(k)} p_{k,k}^{(k)} - p_{i,k}^{(k)} p_{j,k}^{(k)} \right) = \frac{1}{p_{k,k}^{(k)}} \begin{vmatrix} p_{i,j}^{(k)} & p_{i,k}^{(k)} \\ p_{k,j}^{(k)} & p_{k,k}^{(k)} \end{vmatrix} \ \ (1 \leq i \leq j \leq k) \tag{38}$$

と書くことができる。以降主にこの漸化式を考えることにする。

7 小行列式に関する命題

ここで、(35) の漸化式を解くために必要な、小行列式に関するいくつかの命題を紹介する。そのために小行列に関する記号を導入する。$m \times n$ 行列 $S = [s_{i,j}]_{m,n}$ で説明する。

添字の部分列を

$$I = (i_1, \ldots, i_p), \ \ J = (j_1, \ldots, j_q) \quad (1 \leq i_k \leq m, 1 \leq j_\ell \leq n)$$

のように書いて i_k は互いに異なり、j_ℓ も互いに異なるとし、通常は昇順に単調、すなわち $1 \leq i_1 < i_2 < \cdots < i_p \leq m$ であることが多いが、一般には単調性は仮定しない。昇順に単調な場合を「昇順な添字列」と呼ぶことにする。また、I の p、J の q をこの添字列の「長さ」とする。

S の $i_1, \ldots, i_p$ 行目、$j_1, \ldots, j_q$ 列目の要素を順に並べた $p \times q$ の小行列を

$$S_J^I = S_{(j_1, \ldots, j_q)}^{(i_1, \ldots, i_p)} = \begin{bmatrix} s_{i_1,j_1} & \cdots & s_{i_1,j_q} \\ \vdots & & \vdots \\ s_{i_p,j_1} & \cdots & s_{i_p,j_q} \end{bmatrix}$$

のように書く。これは、片方だけの S^I, S_J のように使うこともあるが、S^I は S の $i_1, \ldots, i_p$ 行目を上から順に並べた行列、S_J は S の $j_1, \ldots, j_\ell$ 列目を左から順に並べた行列となる。

また、$[I]$ で、$1,\ldots,m$ から $i_1,\ldots,i_p$ を取り除いた昇順な添字列を表し、S から $i_1,\ldots,i_p$ 行目、$j_1,\ldots,j_q$ 列目を取り除いた $(m-p)\times(n-q)$ の小行列を

$$S_{[J]}^{[I]} = S_{[j_1,\ldots,j_q]}^{[i_1,\ldots,i_p]}$$

のように書くことにする。また、

$$|I| = |(i_1,\ldots,i_p)| = \sum_{k=1}^{p} i_k, \quad |J| = |(j_1,\ldots,j_q)| = \sum_{\ell=1}^{q} j_\ell$$

とする。これらを用いれば、$n=m$ の場合の S の (i,j) 余因子は、

$$\tilde{s}_{i,j} = (-1)^{i+j}\left|S_{[j]}^{[i]}\right| \tag{39}$$

と書け、S の余因子行列 $\tilde{S}$ は

$$\tilde{S} = [\tilde{s}_{j,i}]_{n,n} = \left[(-1)^{j+i}\left|S_{[i]}^{[j]}\right|\right]_{n,n} \tag{40}$$

で、$|S|\neq 0$ の場合の S の逆行列は

$$S = \frac{1}{|S|}\tilde{S} = \frac{1}{|S|}\left[(-1)^{j+i}\left|S_{[i]}^{[j]}\right|\right]_{n,n} \tag{41}$$

となる。

(40) より、余因子行列 S の成分、すなわち 1 次の小行列式は、S の $(n-1)$ 次の小行列式に符号をつけたもの

$$\left|\tilde{S}_{(j)}^{(i)}\right| = (-1)^{j+i}\left|S_{[i]}^{[j]}\right| \tag{42}$$

となっているが、それを拡張した次の命題が成り立つことが知られている ([3], [4])。

命題 2

$n=m$ で、$|S|\neq 0$ のとき、長さ $p\ (1\le p<n)$ の昇順な添字列 I, J に対して次が成り立つ。

$$\left|\tilde{S}_J^I\right| = (-1)^{|I|+|J|}|S|^{p-1}\left|S_{[I]}^{[J]}\right| \tag{43}$$

(42) は、(43) の $p=1$ の場合になっていて、よって命題 2 は (42) の拡張になっている。この命題 2 の証明の前に、次の補題を紹介する。

補題 3

S を $n\times(n-p)$ 行列、J を 1 から n の範囲の長さ p の昇順の添字列、E_n を n 次正方行列とするとき、

$$|(E_n)_J\ \ S| = (-1)^\ell\left|S^{[J]}\right|,\ \ |S\ \ (E_n)_J| = (-1)^m\left|S^{[J]}\right| \tag{44}$$

となる。ここで、ℓ, m は

$$\ell = |J| + \frac{p(p+1)}{2},\quad m = \ell + p(n-p)$$

証明

$$E_n = \left[\begin{array}{ccc}\overrightarrow{e}_1 & \cdots & \overrightarrow{e}_n\end{array}\right],\ S = \left[\begin{array}{ccc}\overrightarrow{s}_1 & \cdots & \overrightarrow{s}_{n-p}\end{array}\right],\ J = (j_1,\ldots,j_p)$$

とすると、1 列目から順番に展開していけば、

$$\begin{aligned}
|(E_n)_J\ \ S| &= \left|\begin{array}{cccccc}\overrightarrow{e}_{j_1} & \cdots & \overrightarrow{e}_{j_p} & \overrightarrow{s}_1 & \cdots & \overrightarrow{s}_{n-p}\end{array}\right| \\
&= (-1)^{j_1+1}\left|\begin{array}{ccc}\overrightarrow{e}^{[j_1]}_{j_2} & \cdots & \overrightarrow{e}^{[j_1]}_{j_p} & S^{[j_1]}\end{array}\right| \\
&= (-1)^{j_1+1}(-1)^{(j_2-1)+1}\left|\begin{array}{cccc}\overrightarrow{e}^{[j_1,j_2]}_{j_3} & \cdots & \overrightarrow{e}^{[j_1,j_2]}_{j_p} & S^{[j_1,j_2]}\end{array}\right| \\
&= \cdots = (-1)^{\ell'}\left|S^{[J]}\right|
\end{aligned}$$

となることがわかる。ここで、ℓ' は、

$$\begin{aligned}
\ell' &= j_1+1+(j_2-1)+1+(j_3-2)+1+\cdots+(j_p-(p-1))+1 \\
&= |J| - \frac{p(p-1)}{2} + p = |J| + \frac{p(p-1)}{2} - p(p-1) + p = \ell - p(p-1)
\end{aligned}$$

となり、$p(p-1)$ は偶数なので $(-1)^{\ell'} = (-1)^\ell$ となって、(44) の前半が示されたことになる。後半は、行列式の列の入れ替えを行えば、

$$|S\ \ (E_n)_J| = \left|\begin{array}{cccccc}\overrightarrow{s}_1 & \cdots & \overrightarrow{s}_{n-p} & \overrightarrow{e}_{j_1} & \cdots & \overrightarrow{e}_{j_p}\end{array}\right|$$

$$
\begin{aligned}
&= (-1)^{n-p}\left| \overrightarrow{e}_{j_1} \quad \overrightarrow{s}_1 \quad \cdots \quad \overrightarrow{s}_{n-p} \quad \overrightarrow{e}_{j_2} \quad \cdots \quad \overrightarrow{e}_{j_p} \right| \\
&= (-1)^{p(n-p)}\left| \overrightarrow{e}_{j_1} \quad \cdots \quad \overrightarrow{e}_{j_p} \quad \overrightarrow{s}_1 \quad \cdots \quad \overrightarrow{s}_{n-p} \right| \\
&= \cdots = (-1)^{p(n-p)}|(E_n)_J \;\; S|
\end{aligned}
$$

となるので、あとは前半部分を使えば後半部分が得られる。$\blacksquare$

命題 2 の証明

$$\tilde{S} = \left[\ \overrightarrow{\tilde{s}}_1 \quad \cdots \overrightarrow{\tilde{s}}_n \ \right]$$

とするとき、$[I] = (i'_1, \ldots, i'_{n-p})$ とし、

$$C = [\tilde{S}_J \;\; (E_n)_{[I]}] = \left[\ \overrightarrow{\tilde{s}}_{j_1} \quad \cdots \quad \overrightarrow{\tilde{s}}_{j_p} \quad \overrightarrow{e}_{i'_1} \quad \cdots \quad \overrightarrow{e}_{i'_{n-p}} \ \right]$$

とする。このとき、$S\tilde{S} = |S|E$ より、

$$S\overrightarrow{\tilde{s}}_i = |S|\overrightarrow{e}_i, \quad S\overrightarrow{e}_i = \overrightarrow{s}_i$$

なので、

$$
\begin{aligned}
SC &= \left[\ |S|\overrightarrow{e}_{j_1} \quad \cdots \quad |S|\overrightarrow{e_{j_p}} \quad \overrightarrow{s}_{i'_1} \quad \cdots \overrightarrow{s}_{i'_{n-p}} \ \right] = \left[|S|(E_n)_J \;\; S_{[I]} \right] \\
&= |S| \left[(E_n)_J \;\; S_{[I]}/|S| \right]
\end{aligned}
$$

となる。よって、補題 3 より

$$
\begin{aligned}
|SC| &= |S|^n \left| (E_n)_J \;\; S_{[I]}/|S| \right| = |S|^n (-1)^\ell \left| S_{[I]}^{[J]}/|S| \right| \\
&= (-1)^\ell |S|^n \left| S_{[I]}^{[J]} \right| /|S|^{n-p} = (-1)^\ell |S|^p \left| S_{[I]}^{[J]} \right|
\end{aligned}
$$

となり、$\ell = |J| + p(p+1)/2$ である。また、$|C|$ については、再び補題 3 より

$$|C| = \left| \tilde{S}_J \;\; (E_n)_{[I]} \right| = (-1)^m \left| \tilde{S}_J^I \right|$$

となり、m は

$$m = |[I]| + \frac{(n-p)(n-p+1)}{2} + (n-p)p = |[I]| + \frac{(n-p)(n+p+1)}{2}$$

である。よって、$|SC| = |S||C|$ より、

$$\left|\tilde{S}_J^I\right| = (-1)^{\ell-m}|S|^{p-1}\left|S_{[I]}^{[J]}\right|$$

となる。あとは $(-1)^{\ell-m}$ を考えればよい。

$$\begin{aligned}
\ell - m &= |J| + \frac{p(p+1)}{2} - |[I]| - \frac{(n-p)(n+p+1)}{2} \\
&= |J| - \left(\frac{n(n+1)}{2} - |I|\right) + \frac{p(p+1)}{2} - \frac{(n-p)(n+p+1)}{2} \\
&= |I| + |J| + k
\end{aligned}$$

とすると、

$$\begin{aligned}
k &= \frac{p(p+1)}{2} - \frac{(n-p)(n+p+1)}{2} - \frac{n(n+1)}{2} \\
&= \frac{p^2}{2} + \frac{p}{2} - \frac{n^2}{2} + \frac{p^2}{2} - \frac{n}{2} + \frac{p}{2} - \frac{n^2}{2} - \frac{n}{2} \\
&= p^2 + p - n^2 - n = p(p+1) - n(n+1)
\end{aligned}$$

となり、よって k は偶数なので $(-1)^{\ell-m} = (-1)^{|I|+|J|}$ となって、これで (43) が示されたことになる。■

系 4

命題 2 と同じ仮定の元、$C = S^{-1}$ とすると、

1. $$\left|C_J^I\right| = \frac{(-1)^{|I|+|J|}}{|S|}\left|S_{[I]}^{[J]}\right|$$

2. $$\left|S_J^I\right| = \frac{(-1)^{|I|+|J|}}{|S|^{n-p-1}}\left|\tilde{S}_{[I]}^{[J]}\right| = (-1)^{|I|+|J|}|S|\left|C_{[I]}^{[J]}\right|$$

証明

$$|[I]| = \frac{n(n+1)}{2} - |I|, \quad |[J]| = \frac{n(n+1)}{2} - |J|$$

より $(-1)^{|[I]|+|[J]|} = (-1)^{|I|+|J|}$、$C = \tilde{S}/|S|$ より、いずれも命題 2 から容易に得られる。■

系 5

$|S| \neq 0$ の仮定を外しても命題 2 は成立する。

証明

$|S| = 0$ のときにも (43) が成り立つことを示せばよい。

今、$S(\varepsilon) = S + \varepsilon E_n$ とすると、

$$|S(\varepsilon)| = |S + \varepsilon E_n| = \varepsilon^n + \cdots$$

という ε の n 次式であり、$|S| = 0$ と仮定すると $|S(0)| = |S| = 0$ となるが、$|S(\varepsilon)| = 0$ となる ε は高々 n 個なので、集積点はなく、よって

「$0 \leq \varepsilon < \delta$ では $|S(\varepsilon)| = 0$ となる ε は $\varepsilon = 0$ のみ」

となるような $\delta > 0$ を取ることができる。よって、$0 < \varepsilon < \delta$ では $|S(\varepsilon)| \neq 0$ だから $S(\varepsilon)$ に対して命題 2 が成立し、

$$\left|\widetilde{S(\varepsilon)}_J^I\right| = (-1)^{|I|+|J|}|S(\varepsilon)|^{p-1}\left|S(\varepsilon)_{[I]}^{[J]}\right| \tag{45}$$

が成り立つ。ここにでてくる行列式はいずれも ε の多項式、よって ε の連続関数で、$\varepsilon \to +0$ のときに明らかに

$$\left|\widetilde{S(\varepsilon)}_J^I\right| \to \left|\tilde{S}_J^I\right|, \quad |S(\varepsilon)| \to |S|, \quad \left|S(\varepsilon)_{[I]}^{[J]}\right| \to \left|S_{[I]}^{[J]}\right|$$

となるから、(45) で $\varepsilon \to +0$ とすれば、$|S| = 0$ のときの (43) が得られる。■

$|S|=0$ の場合は、実際には (43) は、$p=1$ ならば (42) であるから証明は不要で、よって $p>1$ の場合に $\left|\tilde{S}_J^I\right|=0$ となることだけ示せばいいので、このような解析的な証明ではなく、代数的なより易しい証明があるかもしれない。

なお、この後の議論では、$|S|\neq 0$ が保証されていない状態で (43) を使う場面がでてくるので、この系 5 の形に命題 2 を拡張しておく必要があるのである。

補題 6

$n>k$、および $n\times k$ 行列 $S=\begin{bmatrix} \overrightarrow{s}_1 & \cdots & \overrightarrow{s}_k \end{bmatrix}$ に対し、$\overrightarrow{s}_1,\ldots,\overrightarrow{s}_k$ が線形独立であることと、$|{}^tSS|=\left|[\overrightarrow{s}_i\cdot\overrightarrow{s}_j]_{k,k}\right|>0$ であることは同値。

証明

行列式の展開定理により、

$$|{}^tSS|=\sum_{I\in T_k^n}|({}^tS)_I||S^I|=\sum_{I\in T_k^n}|({}^t(S^I)||S^I|=\sum_{I\in T_k^n}|S^I|^2\geq 0$$

となることがわかる。ここで、T_k^n は 1 から n までの範囲の、長さ k の昇順の添字列全体の集合。

よって、$|{}^tSS|=0$ であることはすべての $I\in T_k^n$ に対して $|S^I|=0$ であることと同値で、これは $\operatorname{rank}S<k$ を意味し、そしてこれは S の列ベクトルが線形従属であることと同値。■

8 漸化式の解

本節で、漸化式 (35) の解、すなわち $p_{i,j}^{(k-1)}$ $(m+1\leq k\leq n)$ を具体的な式で書き表す。なお、分母の $p_{k,k}^{(k)}$ $(=d_k^{(k)})$ が 0 ではないという保証もないので、それも同時に考える。

まずは $k=n-1,n-2$ の場合を考える。(35) で $k=n$ とすると、(32) より $p_{n,n}>0$ で、

$$p_{i,j}^{(n-1)}=\frac{1}{p_{n,n}}\begin{vmatrix} p_{i,j} & p_{i,n} \\ p_{n,j} & p_{n,n} \end{vmatrix}\quad(1\leq i\leq j\leq n) \tag{46}$$

となる。よって特に

$$p^{(n-1)}_{n-1,n-1} = \frac{1}{p_{n,n}} \begin{vmatrix} p_{n-1,n-1} & p_{n-1,n} \\ p_{n,n-1} & p_{n,n} \end{vmatrix} = \frac{1}{p_{n,n}} \begin{vmatrix} \overrightarrow{\beta}_{n-1} \cdot \overrightarrow{\beta}_{n-1} & \overrightarrow{\beta}_{n-1} \cdot \overrightarrow{\beta}_{n} \\ \overrightarrow{\beta}_{n} \cdot \overrightarrow{\beta}_{n-1} & \overrightarrow{\beta}_{n} \cdot \overrightarrow{\beta}_{n} \end{vmatrix} \tag{47}$$

であるが、$\overrightarrow{\beta}_{n-1}$ と $\overrightarrow{\beta}_{n}$ は $B = (A')^{-1}$ の列ベクトルだから線形独立で、よって補題 6 より $p^{(n-1)}_{n-1,n-1} > 0$ であることが保証される。

そして、これに対し (35) で $k = n-1$ とすると、

$$p^{(n-2)}_{i,j} = \frac{1}{p^{(n-1)}_{n-1,n-1}} \begin{vmatrix} p^{(n-1)}_{i,j} & p^{(n-1)}_{i,n-1} \\ p^{(n-1)}_{n-1,j} & p^{(n-1)}_{n-1,n-1} \end{vmatrix} \quad (1 \le i \le j \le n-1) \tag{48}$$

となる。これを、(46) を用いて $p_{i,j}$ で表す。(48) の行列式の 4 つの成分は、(46) より、

$$\begin{aligned} p^{(n-1)}_{i,j} &= \frac{1}{p_{n,n}} \begin{vmatrix} p_{i,j} & p_{i,n} \\ p_{n,j} & p_{n,n} \end{vmatrix}, \quad p^{(n-1)}_{i,n-1} = \frac{1}{p_{n,n}} \begin{vmatrix} p_{i,n-1} & p_{i,n} \\ p_{n,n-1} & p_{n,n} \end{vmatrix}, \\ p^{(n-1)}_{n-1,j} &= \frac{1}{p_{n,n}} \begin{vmatrix} p_{n-1,j} & p_{n-1,n} \\ p_{n,j} & p_{n,n} \end{vmatrix}, \quad p^{(n-1)}_{n-1,n-1} = \frac{1}{p_{n,n}} \begin{vmatrix} p_{n-1,n-1} & p_{n-1,n} \\ p_{n,n-1} & p_{n,n} \end{vmatrix}, \end{aligned}$$

なので、その行列式部分は、いずれも

$$X = \begin{bmatrix} p_{i,j} & p_{i,n-1} & p_{i,n} \\ p_{n-1,j} & p_{n-1,n-1} & p_{n-1,n} \\ p_{n,j} & p_{n,n-1} & p_{n,n} \end{bmatrix} \tag{49}$$

の小行列式となっていて、具体的には、

$$\begin{aligned} p^{(n-1)}_{i,j} &= \frac{1}{p_{n,n}} \left| X^{[2]}_{[2]} \right|, \quad p^{(n-1)}_{i,n-1} = \frac{1}{p_{n,n}} \left| X^{[2]}_{[1]} \right|, \\ p^{(n-1)}_{n-1,j} &= \frac{1}{p_{n,n}} \left| X^{[1]}_{[2]} \right|, \quad p^{(n-1)}_{n-1,n-1} = \frac{1}{p_{n,n}} \left| X^{[1]}_{[1]} \right| \end{aligned}$$

なので、これらを (48) に代入すると、

$$p^{(n-2)}_{i,j} = \frac{p_{n,n}}{\left| X^{[1]}_{[1]} \right|} \frac{1}{p^2_{n,n}} \begin{vmatrix} \left| X^{[2]}_{[2]} \right| & \left| X^{[2]}_{[1]} \right| \\ \left| X^{[1]}_{[2]} \right| & \left| X^{[1]}_{[1]} \right| \end{vmatrix} = \frac{1}{p_{n,n} \left| X^{[1]}_{[1]} \right|} \begin{vmatrix} \left| X^{[1]}_{[1]} \right| & -\left| X^{[2]}_{[1]} \right| \\ -\left| X^{[1]}_{[2]} \right| & \left| X^{[2]}_{[2]} \right| \end{vmatrix}$$

$$= \frac{1}{p_{n,n}\left|X_{[1]}^{[1]}\right|}\left|\tilde{X}_{(1,2)}^{(1,2)}\right| \tag{50}$$

となる。ここで、命題 2 (正確には系 5) より、

$$\left|\tilde{X}_{(1,2)}^{(1,2)}\right| = (-1)^{3+3}|X|^{2-1}\left|X_{[1,2]}^{[1,2]}\right| = |X|\left|X_{(3)}^{(3)}\right| = p_{n,n}|X|$$

となるので、よって、(50) は

$$p_{i,j}^{(n-2)} = \frac{|X|}{\left|X_{[1]}^{[1]}\right|} = \frac{1}{\begin{vmatrix} p_{n-1,n-1} & p_{n-1,n} \\ p_{n,n-1} & p_{n,n} \end{vmatrix}}\begin{vmatrix} p_{i,j} & p_{i,n-1} & p_{i,n} \\ p_{n-1,j} & p_{n-1,n-1} & p_{n-1,n} \\ p_{n,j} & p_{n,n-1} & p_{n,n} \end{vmatrix} \tag{51}$$

となる。

次は、$p_{i,j}^{(k-1)}$ の一般項を求める。まず、

$$P = [p_{i,j}]_{n,n} = \begin{bmatrix} p_{1,1} & \cdots & p_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ p_{n,1} & \cdots & p_{n,n} \end{bmatrix} = \left[\overrightarrow{\beta}_i \cdot \overrightarrow{\beta}_j\right]_{n,n} \quad (= {}^tBB) \tag{52}$$

とし、

$$Y_k = P_{(k,k+1,\ldots,n)}^{(k,k+1,\ldots,n)} = \begin{bmatrix} p_{k,k} & \cdots & p_{k,n} \\ \vdots & & \vdots \\ p_{n,k} & \cdots & p_{n,n} \end{bmatrix} \quad (m \le k \le n), \tag{53}$$

$$X_k(i,j) = P_{(j,k,k+1,\ldots,n)}^{(i,k,k+1,\ldots,n)} = \begin{bmatrix} p_{i,j} & p_{i,k} & \cdots & p_{i,n} \\ p_{k,j} & p_{k,k} & \cdots & p_{k,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ p_{n,j} & p_{n,k} & \cdots & p_{n,n} \end{bmatrix} \quad (1 \le i,j \le k-1) \tag{54}$$

とすると、$p_{n-1,n-1}^{(n-1)}$ は (47) より

$$p_{n-1,n-1}^{(n-1)} = \frac{|Y_{n-1}|}{p_{n,n}} = \frac{|Y_{n-1}|}{|Y_n|}$$

で、$p_{i,j}^{(n-2)}$ は (51) より

$$p_{i,j}^{(n-2)}=\frac{|X_{n-1}(i,j)|}{|Y_{n-1}|}$$

となることがわかる。これらより、$p_{k,k}^{(k)}$ $(m+1\leq k\leq n-1)$、および $p_{i,j}^{(k-1)}$ $(1\leq i,j\leq k-1)$ を

$$p_{k,k}^{(k)}=\frac{|Y_k|}{|Y_{k+1}|},\quad p_{i,j}^{(k-1)}=\frac{|X_k(i,j)|}{|Y_k|} \tag{55}$$

と予想し、これを帰納法で証明する。なお、すべての k に対し $|Y_k|>0$ であることは、補題 6 により保証されるので、(55) が成り立てば、$p_{k,k}^{(k)}>0$ も言えることになる。

$k=n-1$ に対しては上で示した通り成立する。なお、$|Y_{n+1}|=1$ と考えれば、$k=n$ に対しても (46) より

$$p_{n,n}^{(n)}=p_{n,n}=|Y_n|=\frac{|Y_n|}{|Y_{n+1}|},\quad p_{i,j}^{(n-1)}=\frac{|X_n(i,j)|}{p_{n,n}}=\frac{|X_n(i,j)|}{|Y_n|}$$

なので (55) は $k=n$ でも成立することになる。

以下、$k=n,n-1,\ldots,\ell+1$ までは成立したとして、$k=\ell$ の場合に成立することを示す $(m+1\leq\ell<n-1)$。

(55) の後者の $k=\ell+1$ の式より、

$$p_{\ell,\ell}^{(\ell)}=\frac{|X_{\ell+1}(\ell,\ell)|}{|Y_{\ell+1}|}=\frac{|Y_\ell|}{|Y_{\ell+1}|}$$

は成立するので、これで (55) の $k=\ell$ の最初の式が得られる。後は (55) の後者の $k=\ell$ の式を示せばよい。漸化式 (35) より、

$$p_{i,j}^{(\ell-1)}=\frac{1}{p_{\ell,\ell}^{(\ell)}}\begin{vmatrix} p_{i,j}^{(\ell)} & p_{i,\ell}^{(\ell)} \\ p_{\ell,j}^{(\ell)} & p_{\ell,\ell}^{(\ell)} \end{vmatrix}$$

となるが、帰納法の仮定、すなわち (55) の後者の $k=\ell+1$ の式より、

$$p_{i,j}^{(\ell)}=\frac{|X_{\ell+1}(i,j)|}{|Y_{\ell+1}|},\ p_{i,\ell}^{(\ell)}=\frac{|X_{\ell+1}(i,\ell)|}{|Y_{\ell+1}|},\ p_{\ell,j}^{(\ell)}=\frac{|X_{\ell+1}(\ell,j)|}{|Y_{\ell+1}|},\ p_{\ell,\ell}^{(\ell)}=\frac{|X_{\ell+1}(\ell,\ell)|}{|Y_{\ell+1}|}$$

であり、これらの分子は、いずれも

$$Z = P^{(i,\ell,\ell+1,\ldots,n)}_{(j,\ell,\ell+1,\ldots,n)} = X_\ell(i,j)$$

の余因子と書ける。すなわち、

$$p^{(\ell)}_{i,j} = \frac{\left|Z^{[2]}_{[2]}\right|}{|Y_{\ell+1}|},\ \ p^{(\ell)}_{i,\ell} = \frac{\left|Z^{[2]}_{[1]}\right|}{|Y_{\ell+1}|},\ \ p^{(\ell)}_{\ell,j} = \frac{\left|Z^{[1]}_{[2]}\right|}{|Y_{\ell+1}|},\ \ p^{(\ell)}_{\ell,\ell} = \frac{\left|Z^{[1]}_{[1]}\right|}{|Y_{\ell+1}|}$$

なので、命題 2 (正確には系 5)、および $X_{\ell+1}(\ell,\ell) = Y_\ell$ より、

$$\begin{aligned}
p^{(\ell-1)}_{i,j} &= \frac{|Y_{\ell+1}|}{|Y_\ell|}\frac{1}{|Y_{\ell+1}|^2}\begin{vmatrix} \left|Z^{[2]}_{[2]}\right| & \left|Z^{[2]}_{[1]}\right| \\ \left|Z^{[1]}_{[2]}\right| & \left|Z^{[1]}_{[1]}\right| \end{vmatrix} = \frac{1}{|Y_\ell||Y_{\ell+1}|}\begin{vmatrix} \left|Z^{[1]}_{[1]}\right| & -\left|Z^{[2]}_{[1]}\right| \\ -\left|Z^{[1]}_{[2]}\right| & \left|Z^{[2]}_{[2]}\right| \end{vmatrix} \\
&= \frac{1}{|Y_\ell||Y_{\ell+1}|}\left|\tilde{Z}^{(1,2)}_{(1,2)}\right| = \frac{1}{|Y_\ell||Y_{\ell+1}|}(-1)^{3+3}|Z|^{2-1}\left|Z^{[1,2]}_{[1,2]}\right| \\
&= \frac{|X_\ell(i,j)||Y_{\ell+1}|}{|Y_\ell||Y_{\ell+1}|} = \frac{|X_\ell(i,j)|}{|Y_\ell|}
\end{aligned}$$

となり、これで (55) 後者の $k = \ell$ の式も得られた。これで、帰納法により確かに (55) が成立することが証明された。

よって、(55) で $k = m+1$ とすれば、最終的な係数

$$p^{(m)}_{i,j} = \frac{|X_{m+1}(i,j)|}{|Y_{m+1}|} = \frac{\left|P^{(i,m+1,\ldots,n)}_{(j,m+1,\ldots,n)}\right|}{\left|P^{(m+1,\ldots,n)}_{(m+1,\ldots,n)}\right|} \quad (1 \le i,j \le m) \tag{56}$$

が得られる。

9 元の行列に対する条件

6 節最後に述べたように、$y_1,\ldots,y_m$ の独立性は、$1 \le i,j \le m$, $i \ne j$ のすべての i,j に対して y_iy_j の係数 $p^{(m)}_{i,j}$ が 0 になることと同値になる。よって、(56) より、それは

$$\left|P^{(i,m+1,\ldots,n)}_{(j,m+1,\ldots,n)}\right| = 0 \quad (1 \le i,j \le m,\ i \ne j) \tag{57}$$

となる。なお、P は対称行列で、よってこの行列の転置は i と j を入れ替えたものになるので、これは $i<j$ だけでなく、$i>j$ でも成り立つことに注意する。

この条件 (57) を、元の行列 A に対する条件に書き直す。

P は、(27), (52) より

$$P = {}^tBB = {}^t((A')^{-1})\,(A')^{-1} = ({}^tA')^{-1}\,(A')^{-1} = ((A')\,{}^tA')^{-1} \tag{58}$$

であり、

$$(A')\,{}^tA' = \begin{bmatrix} \overrightarrow{\alpha}_1 \\ \vdots \\ \overrightarrow{\alpha}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} {}^t\overrightarrow{\alpha}_1 & \cdots & {}^t\overrightarrow{\alpha}_n \end{bmatrix} = [\overrightarrow{\alpha}_i \cdot \overrightarrow{\alpha}_j]_{n,n} \tag{59}$$

となり、この行列を $Q=[q_{i,j}]_{n,n}$ とすると、$P=Q^{-1}, Q=P^{-1}$ となる。よって、系 4 により、

$$\left|P^{(i,m+1,\ldots,n)}_{(j,m+1,\ldots,n)}\right| = \frac{(-1)^{i+j}}{|Q|}\left|Q^{[j,m+1,\ldots,n]}_{[i,m+1,\ldots,m]}\right| = \frac{(-1)^{i+j}}{|(A')\,{}^tA'|}\left|Q^{(1,\ldots,[j],\ldots,m)}_{(1,\ldots,[i],\ldots,m)}\right| \tag{60}$$

となる。ここで、$(1,\ldots,[k],\ldots,m)$ は $(1,\ldots,m)$ から k のみを取り除いた添字列、すなわち

$$(1,\ldots,[k],\ldots,m) = (1,\ldots,k-1,k+1,\ldots,m)$$

を表すものとする。ここで、

$$R = Q^{(1,\ldots,m)}_{(1,\ldots,m)} \tag{61}$$

とすると、

$$R = [\overrightarrow{\alpha}_i \cdot \overrightarrow{\alpha}_j]_{m,m} = A\,{}^tA \tag{62}$$

となるので、元々の仮定より A の行ベクトル $\overrightarrow{\alpha}_1,\ldots,\overrightarrow{\alpha}_m$ は線形独立なので、${}^tA$ の列ベクトル ${}^t\overrightarrow{\alpha}_1,\ldots,{}^t\overrightarrow{\alpha}_m$ も線形独立となり、補題 6 より $|R|>0$ となる。よって、R には逆行列 R^{-1} もあることになる。

一方 (60) の最後の行列式は R の余因子となるので、条件 (57) は結局、

$$\left|Q^{(1,\ldots,[j],\ldots,m)}_{(1,\ldots,[i],\ldots,m)}\right| = \left|R^{[j]}_{[i]}\right| = 0 \quad (1 \leq i, j \leq m,\ i \neq j) \tag{63}$$

と書ける。この条件は、R の余因子行列が対角行列以外 0 であることを意味し、よって R^{-1} が対角行列であることと同値になる。そしてそれは R 自身が対角行列であることと同値となるが、

$$R = [\overrightarrow{\alpha}_i \cdot \overrightarrow{\alpha}_j]_{m,m}$$

より R が対角行列であることは、$\overrightarrow{\alpha}_1, \ldots, \overrightarrow{\alpha}_m$ が互いに垂直であることと同値になる。

結局、$m < n$ で A の行列が線形独立の場合も、$y_1, \ldots, y_m$ が独立であることは、$m = n$ の場合と同じく、A の行ベクトルが互いに垂直であることと同値になる。

10 最後に

以上をまとめると、$y_1, \ldots, y_m$ の独立性は以下のようになる。

- (2) のように x_j の平均と分散が揃っていないときは、標準化することで (7) の形にしてから判定する (以降は $x_j \sim N(0,1)$ とする)
- $\overrightarrow{\alpha}_i$ $(1 \leq i \leq m)$ が線形従属のときは $y_1, \ldots, y_m$ は独立ではない
- $\overrightarrow{\alpha}_i$ $(1 \leq i \leq m)$ が線形独立のとき、$y_1, \ldots, y_m$ が独立となるのはこのベクトルが互いに垂直のとき

なお、最初の標準化については、すべての x_j の分散が同じ $(= \sigma)$ であれば、

$$A \oplus \overrightarrow{\sigma} = \sigma A$$

となるので、実は標準化は必要なく、直接その $\overrightarrow{x}_i$ の係数のベクトルの線形独立性と垂直性で判定できる。

参考文献

[1] 竹野茂治「多次元確率分布と独立性」(2022)
http://takeno.iee.niit.ac.jp/~shige/math/lecture/graduate/data/ndimrandvar1.pdf

[2] 竹野茂治「正規確率変数の一次式」(2022)
http://takeno.iee.niit.ac.jp/~shige/math/lecture/graduate/data/normal1.pdf

[3] 高木貞治「代数学講義 改訂新版」、共立出版 (1965)

[4] 福井敏純「線形代数学講義ノート」(2022)
http://www.rimath.saitama-u.ac.jp/lab.jp/Fukui/lectures/Linear_algebra.pdf