ある直交ベクトル系生成アルゴリズム[1)]

関　本　年　彦

本論では，新しい直交ベクトル系生成アルゴリズムについて述べる。このアルゴリズムは林武司[2)] によって提唱されたもので，筆者がそれに若干の拡張を加えたものである。

このアルゴリズムの特色はシュミット（Schmidt）の直交化法に比べ，はるかに簡単なことであり，コンピュータ・プログラム用アルゴリズムとして用途が広いと考えられる。

もともと，このアルゴリズムは正規分布に関する議論の中で見い出されたものなので，本論においてもはじめに正規分布について概説した後，主題のアルゴリズムとその応用について述べることにする。

§1．線形代数的予備考察

正規分布の考察に際しては，線形代数の枠組みと若干の幾何学的視点の援用が有効である。そこで，本論で用いる線形代数の概念，記法などを解説しておく。

$\mathfrak{R}$は実数空間とし，$\mathfrak{R}^n$ はn次元列ベクトル空間を表すことにする。x が $\mathfrak{R}^n$ の要素であれば

(1．1)　$$x=\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \qquad x_i \in \mathfrak{R}$$

と表されるが，これを $x=(x_i)$ と略記することもある。また，転置行列の

1）本論文は，成城大学教員特別助成による研究成果の一端をまとめたものである。

2）東京大学農学部農業生物学科

記法を用いれば，$x={}^t(x_1,\cdots, x_n)$ である。各 $x=(x_i)$，$y=(y_i)\in\Re^n$ に対して，それらの内積 $x_1y_1+\cdots+x_ny_n$ を$<x, y>$で表す。$<x, x>^{1/2}$ はベクトルxの長さである。

e_i（$1\leq i\leq n$）は第 i 要素が1でほかの要素はすべて0であるような列ベクトルとすると，$\{e_1,\cdots, e_n\}$ は $\Re^n$ の標準基底である。$x=(x_i)$ は点 x の基底 $\{e_1,\cdots, e_n\}$ に関する座標であると考えると，

（1．2）　$$\mathrm{x}=\sum_{i=1}^{n} e_i x_i$$

と表せる。別の正規直交基底 $\{u_1,\cdots, u_n\}$（各 u_i の長さが1で，$<u_i, u_k>=0$（$i\neq k$）であるような基底）に関する座標 $z=(z_i)$ は

（1．3）　$$\mathrm{x}=\sum_{i=1}^{n} e_i x_i=\sum_{i=1}^{n} u_i z_i$$

で与えられる。$\varphi(e_i)=u_i(1\leq i\leq n)$ で定義される座標変換の線形写像φは，基底 $\{e_1,\cdots, e_n\}$ に関して行列 $T=(<e_i, u_k>)$ で表され，（1．3）と $\sum_{i=1}^{n} u_i z_i=\sum_{i, k=1}^{n} e_i<e_i, u_k>z_k$ とから $x_i=\sum_{k=1}^{n}<e_i, u_k>z_k$（$1\leq i\leq n$）が成り立つことより

（1．4）　$$x=Tz$$

を得る。このTを $\{e_1,\cdots, e_n\}$ から $\{u_1,\cdots, u_n\}$ への座標変換の行列といい，φは正規直交基底を正規直交基底へ写すからTは直交行列，すなわち $T^{-1}={}^tT$ が成り立つ。

Xを確率変数とするとき，**X**の期待値を $\mathbf{E}(\mathbf{X})$ と記すことにする。**X**の分布が密度関数 $f(x)$ を持つならば

$$\mathbf{E}(\mathbf{X})=\int_{-\infty}^{+\infty} xf(x)dx$$

である。**X**の分散 $\mathbf{E}((\mathbf{X}-\mathbf{E}(\mathbf{X}))^2)$ は，$\mathrm{Var}(\mathbf{X})$ と記す。二つの確率変数**X**，**Y**の共分散 $\mathbf{E}((\mathbf{X}-\mathbf{E}(\mathbf{X}))(\mathbf{Y}-\mathbf{E}(\mathbf{Y})))$ を $\mathrm{Cov}(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ と記す。**X**，**Y**の同時分布が密度関数 $f(x, y)$ を持つならば

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{X},\ \mathbf{Y})=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}(x-\lambda)(y-\mu)f(x,\ y)dxdy,$$

$$\lambda=\mathbf{E}(\mathbf{X}),\ \mu=\mathbf{E}(\mathbf{Y})$$

である。

$\mathbf{X}$ は確率変数 $\mathbf{X}_1,\cdots,\mathbf{X}_n$ を要素とする確率ベクトル，すなわち

$$\mathbf{X}=\begin{pmatrix}\mathbf{X}_1\\ \vdots \\ \mathbf{X}_n\end{pmatrix}$$

とするとき，$\mathbf{E}(\mathbf{X}_i)$ を要素とする n 次元列ベクトル（$\mathbf{E}(\mathbf{X}_i)$）を $\mathbf{E}(\mathbf{X})$ と記す。この記法により，Aを $m\times n$ 行列とすると

(1．5)　　$\mathbf{E}(A\mathbf{X})=A\mathbf{E}(\mathbf{X})$

が成り立つ。さらに，$\mathbf{M}$ を確率変数 $\mathbf{M}_{ik}$ を（$i,\ k$）要素とする確率行列とするとき，$\mathbf{E}(\mathbf{M}_{ik})$ を（$i,\ k$）要素とする行列を $\mathbf{E}(\mathbf{M})$ と記すことにする。この記法を用いて，$\mathbf{X}$ が n 次元確率ベクトルであるとき，行列 $\mathbf{E}(\mathbf{X}{}^t\mathbf{X})$ を $\mathbf{X}$ の共分散行列といい，$\mathrm{Var}(\mathbf{X})$ と記す。Aを $m\times n$ 行列とすると

(1．6)　　$\mathrm{Var}(A\mathbf{X})=A\ \mathrm{Var}(\mathbf{X})\,{}^tA$

が成り立つ。

§ 2. n 次元正規密度関数

この § では，とくに断わらないかぎり確率ベクトルの次元は n とし，扱うベクトルの次元も n とする。

2．1． 諸性質

(2．1)　　$q(x)={}^txQx=\sum_{i,\ k=1}^{n}q_{ik}x_ix_k,\qquad x\in\mathfrak{R}^n$

を正値 2 次形式[3] とするとき，

3)　2 次形式が正値であるとは，0 でない $x\in\mathfrak{R}^n$ に対して $q(x)>0$ が成り立つことであり，このとき行列 $Q=(q_{ij})$ は正値であるという。

$$(2.\ 2)\qquad \varphi(x)=\gamma^{-1}\exp\left\{-\frac{1}{2}q(x)\right\},\qquad \gamma>0,\ x\in\mathfrak{R}^n$$

のような形式の密度関数を，原点を中心とする正規密度関数という。$a=(a_i)$ を $\mathfrak{R}^n$ の点 a の座標とするとき，$\varphi(x-a)$ を点 a を中心とする正規密度関数という。

正規分布は，以下に掲げるような顕著な性質をもっている。なお，以下ではとくに断わらないかぎり，正規密度関数あるいは正規分布は原点を中心とするものとする。

(1) 正規密度関数の周辺 (marginal) 密度関数は，また正規密度関数である。

(2) 正規確率ベクトルは，適当な直交変換により要素がたがいに独立であるような正規確率ベクトルに変換される。

(3) $\mathbf{X}$ が正規（(2. 2) を密度関数にもつ正規確率ベクトル）であるとき，$\varphi(x)$ に現われる Q は $\mathbf{X}$ の共分散行列 M の逆行列であり，γ は $\gamma^2=(2\pi)^n\det(M)$ で定められる。

(4) 確率変数 $\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ の同時分布が正規（$\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ を要素にもつ 2 次元確率ベクトルの分布が 2 次元正規密度関数をもつ）ならば，$\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ が独立であることと $\mathrm{Cov}(\mathbf{X},\ \mathbf{Y})=0$ とは同値である。

(5) $\mathbf{X}$ が正規であるとき，$\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1}$ が与えられたときの $\mathbf{X}_n$ の条件付期待値は $\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1}$ の 1 次結合である：$\mathbf{E}(\mathbf{E}_n\,|\,\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1})=a_1\mathbf{X}_1+\cdots+a_{n-1}\mathbf{X}_{n-1}$.

2. 2. 数学的考察

正規密度関数 (2. 2) の周辺密度関数

$$(2.\ 3)\qquad \phi(x_{i_1},\cdots,\ x_{i_p})=\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x)\,dx_{k_1}\cdots dx_{k_{n-p}}$$

の正規性については，

(2．4)　　$$\phi(x_1,\cdots,\ x_{n-1})=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x)dx_n$$

が $n-1$ 次元正規密度関数になることを示せば十分である。ただし，(2．3) については，$\{i_1,\cdots,\ i_p\}(1\leq p<n)$ は $\{1,\cdots,\ n\}$ の部分集合であり，$\{k_1,\cdots,\ k_{n-p}\}$ は $\{1,\cdots,\ n\}$ に関する $\{i_1,\cdots,\ i_p\}$ の補集合である。はじめに，$x_1=\cdots=x_{n-1}=0,\ x_n\neq 0$ とすると，$q(x)=q_{nn}x_n^2$ で $q(x)$ は正値であるから $q_{nn}>0$ でなければならない。したがって，

(2．5)　　$$\begin{aligned}q(x)&=q_{nn}(x_n^2+2q_{nn}^{-1}x_n\sum_{i=1}^{n-1}q_{in}x_i)+\sum_{i,\ k=1}^{n-1}q_{ik}x_ix_k\\&=q_{nn}(x_n+q_{nn}^{-1}\sum_{i=1}^{n-1}q_{in}x_i)^2+p(x')\end{aligned}$$

と変形できる。あきらかに $p(x')$ は $x_1,\cdots,\ x_{n-1}$ に関する2次形式であり，x' として0でないベクトルをとり，$x_n=-q_{nn}^{-1}\sum_{i=1}^{n-1}q_{in}x_i$ とすれば $p(x')=q(x)>0$ であるから $p(x')$ は正値である。変数変換 $y=\sqrt{q_{nn}}(x_n+q_{nn}^{-1}\sum_{i=1}^{n-1}q_{in}x_i)$ により

(2．6)　　$$\begin{aligned}\phi(x_1,\cdots,\ x_{n-1})&=\gamma^{-1}\exp\left\{-\frac{1}{2}p(x')\right\}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(-\frac{1}{2}y^2\right)\frac{dy}{\sqrt{q_{nn}}}\\&=\sqrt{\frac{2\pi}{q_{nn}}}\gamma^{-1}\exp\left\{-\frac{1}{2}p(x')\right\}\end{aligned}$$

を得るから，$\phi(x_1,\cdots,\ x_{n-1})$ は正規密度関数である。

定理 2．1　正規確率ベクトル $\mathbf{X}$ は，行列式が正の適当な直交行列 C によって，各要素 $\mathbf{Z}_i$ がたがいに独立な正規分布をする確率変数となるような確率ベクトル $\mathbf{Z}=C\mathbf{X}$ に変換できる。

証明　$\mathbf{X}$ の密度関数が (2．2) で与えられたとすると，Q は対称行列であるからそれを対角化する $\det(C)=1$ であるような直交行列 C が存在する。$z=Cx$ とすれば，$q(x)={}^txQx={}^tzCQ^tCz$ であり，これが z の2次形式

としても正値であることは正値の定義から明らかである。CQ^tC は対角行列であるからその対角要素を $d_1,\cdots, d_n$ とすると $q(x)=\sum_{i=1}^{n} d_i z_i^2$ $(z=(z_i))$ であり，$\mathbf{Z}$ の密度関数は

$$\phi(z)=\gamma^{-1}\exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} d_i z_i^2\right\}=\gamma^{-1}\prod_{i=1}^{n}\exp\left\{-\frac{1}{2}d_i z_i^2\right\}$$

となるから，各 $\mathbf{Z}_i(1\leq i<n)$ はたがいに独立である。 □

定理 2．2 $\mathbf{X}$ は（2．2）を密度関数にもつ正規確率ベクトルとするとし，$M=\mathrm{Var}(\mathbf{X})$ とすると，M は Q の逆行列であり，

(2．7) $\qquad \gamma^2=(2\pi)^n\det(M)$

が成り立つ。

証明 $\mathbf{Z}$, C は前定理の通りとすると，$\mathrm{Var}(\mathbf{Z})=CM^tC$ は $\mathrm{Var}(\mathbf{Z}_i)=\sigma_i^2$ を対角要素とする対角行列である。したがって，$\mathbf{Z}$ の密度関数は

$$\prod_{i=1}^{n}(2\pi\sigma_i^2)^{-1/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{z_i}{\sigma_i}\right)^2\right\}$$

であり，

$$\gamma=\prod_{i=1}^{n}(2\pi\sigma_i^2)^{1/2}, \qquad CQ^tC=\begin{pmatrix}\sigma_1^{-2} & 0\\ 0 & \sigma_n^{-2}\end{pmatrix}$$

が成り立つ。これらから，$\gamma^2=(2\pi)^n\det(CM^tC)=(2\pi)^n\det(M)$ と $Q^{-1}=M$ が得られる。 □

正値対角行列の対角要素はすべて正であることに注意すれば，Q が対角行列であることと M が対角行列であることとは同値であることがわかる。したがって，つぎの系を得る。

系 $\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ の同時分布が正規であるならば，$\mathrm{Cov}(\mathbf{X},\ \mathbf{Y})=0$ は $\mathbf{X}$ と $\mathbf{Y}$ が独立であることの必要十分条件である。

定理 2．3 $\mathbf{X}$ が正規であるとき，$\mathbf{X}_1,\cdots, \mathbf{X}_{n-1}$ が与えられたときの $\mathbf{X}_n$ の

条件付期待値は $\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1}$ の1次結合である。すなわち，

(2．8) $$\mathbf{E}(\mathbf{X}_n|\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1})=a_1\mathbf{X}_1+\cdots+a_{n-1}\mathbf{X}_{n-1}$$

が成り立つ。さらに，$\mathbf{X}$ の密度関数が（2．2）であるとして，条件付分散は $q_{nn}{}^{-1}$ である。

証明　$\mathbf{X}_1=x_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1}=x_{n-1}$ が与えられたときの $\mathbf{X}_n$ の条件付密度関数は $\mathbf{X}$ の密度関数（2．2）を $\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1}$ の周辺密度関数（2．6）で割ったものであるから，（2．5），（2．6）から

(2．9) $$\sqrt{\frac{q_{nn}}{2\pi}}\exp\left\{-\frac{1}{2}q_{nn}\left(x_n+\frac{1}{q_{nn}}\sum_{i=1}^{n-1}q_{in}\,x_i\right)^2\right\}$$

である。したがって，

$$\mathbf{E}(\mathbf{X}_n|\mathbf{X}_1=x_1,\cdots,\ \mathbf{X}_{n-1}=x_{n-1})=-\frac{1}{q_{nn}}\sum_{i=1}^{n-1}q_{in}x_i$$

であり，これから（2．8）を得る。また，（2．9）から，条件付分散が $q_{nn}{}^{-1}$ であることが明らかである。 □

§3.　2次元正規分布

この§では，前§に述べたベクトル記法にはとらわれずに議論を進める。一方，前§と同様に，とくに断わらないかぎり正規分布は原点を中心とするものとする。

$\mathbf{X}$, $\mathbf{Y}$ の同時分布が正規分布であり，$\mathrm{Var}(\mathbf{X})=\sigma_x{}^2$, $\mathrm{Var}(\mathbf{Y})=\sigma_y{}^2$, $\mathrm{Cov}(\mathbf{X},\mathbf{Y})=\rho\sigma_x\sigma_y$ とすると，共分散行列 M は

(3．1) $$M=\begin{pmatrix}\sigma_x{}^2 & \rho\sigma_x\sigma_y\\ \rho\sigma_x\sigma_y & \sigma_y{}^2\end{pmatrix}$$

である。定理 2．2 により，

(3．2) $$\gamma=2\pi\sigma_x\sigma_y\sqrt{1-\rho^2},$$

(3．3) $$Q=M^{-1}=\frac{1}{\sigma_x{}^2\sigma_y{}^2(1-\rho^2)}\begin{pmatrix}\sigma_y{}^2 & -\rho\sigma_x\sigma_y\\ -\rho\sigma_x\sigma_y & \sigma_x{}^2\end{pmatrix}$$

したがって，**X**，**Y** の同時密度関数は

(3．4)　　$$f(x,\ y)=\gamma^{-1}\exp\left[-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left\{\left(\frac{x}{\sigma_x}\right)^2-2\rho\frac{x}{\sigma_x}\ \frac{y}{\sigma_y}+\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right\}\right]$$

である。

§２，(2．1) の２次形式 $q(x)$ を

(3．5)　　$$q(x,\ y)=ax^2+2bxy+cy^2$$

と書けば，

(3．6)　　$$a=\sigma_y{}^2\Delta,\ c=\sigma_x{}^2\Delta,\ b=\rho\sigma_x\sigma_y\Delta,\ \Delta=ac-b^2=(\sigma_x{}^2\sigma_y{}^2(1-\rho^2))^{-1}$$

のような関係がある。

また，

$$q(x,\ y)=\frac{1}{1-\rho^2}\left(\frac{y}{\sigma_y}-\rho\frac{x}{\sigma_x}\right)^2+\left(\frac{x}{\sigma_x}\right)^2$$

と書けるから，**X** の周辺密度関数 $f_x(x)$ は，

(3．7)　　$$\begin{aligned} f_x(x)&=\int_{-\infty}^{+\infty}f(x,y)dy \\ &=\int_{-\infty}^{+\infty}\gamma^{-1}\exp\left[-\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{1-\rho^2}\left(\frac{y}{\sigma_y}-\rho\frac{x}{\sigma_x}\right)^2+\left(\frac{x}{\sigma_x}\right)^2\right\}\right]dy \\ &=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_x}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma_x}\right)^2\right\} \end{aligned}$$

である。同様に，**Y** の周辺密度関数 $f_y(y)$ は，

(3．8)　　$$f_y(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\sigma_y}\exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right\}$$

である。

X$=x$ が与えられたときの **Y** の条件付密度関数は，**X**，**Y** の同時密度関数 (3．4) を **X** の周辺密度関数 (3．7) で割ったものあるから

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi(1-\rho^2)}\,\sigma_y}\exp\left\{-\frac{1}{2(1-\rho^2)}\left(\frac{y}{\sigma_y}-\rho\frac{x}{\sigma_x}\right)^2\right\}$$

である。

§ 4. 直交基底生成アルゴリズム

4．1． 直交基底生成アルゴリズム

$v\in\mathfrak{R}^n$ を単位ベクトル，I を単位行列とする。行列 $F=v{}^tv$ が表す線形写像は射影（すなわち，$F^2=F$）であるから，$G=I-F$ とおくとGが表す線形写像も射影で，$\mathfrak{R}^n$ は $F(\mathfrak{R}^n)$ と $G(\mathfrak{R}^n)$ の直和となる。（ただし，$F(\mathfrak{R}^n)$ と $G(\mathfrak{R}^n)$ はそれぞれFおよびGが表す線形写像による $\mathfrak{R}^n$ の像である。）すなわち，$\mathfrak{R}^n=F(\mathfrak{R}^n)\oplus G(\mathfrak{R}^n)$ が成り立ち，とくに $F(\mathfrak{R}^n)$ は v によって生成される1次元部分空間である。さらに，${}^tF=F$ であるから，$x\in F(\mathfrak{R}^n)$，$y\in G(\mathfrak{R}^n)$ に対して $<x, y>=<Fx, Gy>=<x, FGy>=<x, 0>=0$ が成り立ち，$F(\mathfrak{R}^n)$ と $G(\mathfrak{R}^n)$ は直交することがわかる。すなわち，F, G は正射影系をなす。以上から，つぎの定理を得る。

定理 4．1　vを単位ベクトルとすると，行列 $G=I-v{}^tv$ が表す線形写像は v を法線ベクトルとする超平面（$n-1$ 次元部分空間）への正射影である。

アルゴリズム（法線ベクトル v をもつ超平面上の直交基底）以下では，$v=(x_i)$ はかならずしも単位ベクトルである必要はなく，0ベクトルでない任意のn次元列ベクトルとし，v を法線ベクトルにもつ超平面上の直交基底 $\{v_1, v_2,\cdots, v_{n-1}\}$ を作ることにする。はじめに，各 $i(1\leq i\leq n)$ について，$x_i=0$ のときは v_i として e_i を採る。残りの $i=i_1,\cdots, i_p$ については $x_i\neq 0$ と仮定するが，$p=1$ の場合は，すでにすべての $v_1, v_2,\cdots, v_{n-1}$ が求められたことになる。$p>1$ の場合は，簡単のために $\{i_1,\cdots, i_p\}=\{1,\cdots, p\}$ と仮定すれば，各 $k(1\leq k\leq p-1)$ に対して

(4．1)　$$v_k={}^t(x_1, x_2,\cdots, x_k, \alpha, 0,\cdots, 0),\quad \alpha=-(x_1{}^2+\cdots+x_k{}^2)/x_{k+1}$$

とすればよい。

例　$v={}^t(\alpha,\ 0,\ \beta,\ \gamma)$ $(\alpha\neq0,\ \beta\neq0,\ \gamma\neq0)$ であるとき

$$v_1=\begin{pmatrix}\alpha\\0\\-\dfrac{\alpha^2}{\beta}\\0\end{pmatrix},\quad v_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},\quad v_3=\begin{pmatrix}\alpha\\0\\\beta\\-\dfrac{\alpha^2+\beta^2}{\gamma}\end{pmatrix}$$

である。

4．2．応用

$\mathbf{X}$ は $\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_n$ を要素とする確率ベクトルとするとき，

$$\hat{\mathbf{X}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{X}_i,\qquad \hat{\sigma}^2=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{X}_i-\hat{\mathbf{X}})^2$$

をそれぞれ標本平均および標本分散という。

定理 4．2　$\mathbf{X}_1,\cdots,\ \mathbf{X}_n$ はたがいに独立な平均 0 分散 1 の正規分布をするとき，$\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{X}_i-\hat{\mathbf{X}})^2$ は自由度 $n-1$ のカイ 2 乗分布をする。

証明　$\hat{x}=\sum_{i=1}^{n}x_i/n,\ y_i=x_i-\hat{x}(1\leq i\leq n)$ とおく。座標が $x=(x_i)$ である点 x を座標が $y=(y_i)$ である点 y へ写す線形写像を f，標準基底に関して f を表す行列を F とすると，x としてとくに e_i をとれば $Fe_i=e_i-\sum_{i=1}^{n}e_i/n$ $(1\leq i\leq n)$ であるから，

$v={}^t(1/\sqrt{n},\cdots,\ 1/\sqrt{n})$ とおくと，v は単位ベクトルで

$$F=I-v{}^tv$$

である。そこで，$\{u_1,\cdots,\ u_{n-1}\}$ を v を法線ベクトルとする超平面上の正規直交基底とすると，これに $u_n=v$ を加えて全空間 $\mathfrak{R}^n$ の正規直交基底が得られる。x の基底 $\{u_i\}$ に関する座標を $z=(z_i)$ とし，T を $\{e_i\}$ から $\{u_i\}$ への座標変換の行列とする（式（1．4）参照）。$\mathbf{Z}={}^tT\mathbf{X}$ とおくと，$\mathrm{Var}(\mathbf{Z})={}^tT\mathrm{Var}(\mathbf{X})T={}^tTIT=I$（(1．6) 参照）であるから，定理 2．2 に

より $\mathbf{Z}$ の各要素 $\mathbf{Z}_i (1 \leq i \leq n)$ はたがいに独立な平均0分散1の正規分布をする。

一方，f は v を法線ベクトルとする超平面上への正射影であったから，$f(u_i)=u_i\ (1 \leq i \leq n-1), f(u_n)=0$ であり，したがって，

$$\sum_{i=1}^{n} y_i^2 = <f(x),\ f(x)> = <f(\sum_{i=1}^{n} u_i z_i),\ f(\sum_{k=1}^{n} u_k z_k)>$$

$$= <\sum_{i=1}^{n} f(u_i) z_i,\ \sum_{k=1}^{n} f(u_k) z_k> = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} <u_i,\ u_k> z_i z_k$$

$$= \sum_{i=1}^{n-1} z_i^2.$$

すなわち，

$$(4.\ 2) \qquad \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{X}_i - \hat{\mathbf{X}})^2 = \mathbf{Z}_1^2 + \cdots + \mathbf{Z}_{n-1}^2$$

が得られる。 □

系　$\mathbf{X}_1, \cdots, \mathbf{X}_n$ はたがいに独立な平均0分散1の正規分布をするとき，標本平均 $\hat{\mathbf{X}}$ と標本分散 $\hat{\sigma}^2$ は独立である。

証明　$\{e_i\}$ から $\{u_i\}$ への座標変換の行列 $T=(<e_i,\ u_k>)$ の列ベクトルは $u_1, \cdots, u_n$ であり，$\mathbf{Z}={}^tT\mathbf{X}$ であるから $\mathbf{Z}_n = <u_n, \mathbf{X}> = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{X}_i$ を得る。したがって，$\hat{\mathbf{X}} = \frac{1}{\sqrt{n}} \mathbf{Z}_n$ が成り立つ。一方，$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n-1} \mathbf{Z}_i^2$ であるから，(4. 2) と併せて $\hat{\mathbf{X}}$ と $\hat{\sigma}^2$ とは独立であることがわかる。□

$\mathbf{Z}_i (1 \leq i \leq n-1)$ の計算　4. 1のアルゴリズムによって $u_i (1 \leq i \leq n-1)$ を計算して見ると，$v=(x_i), x_i=1 (1 \leq i \leq n)$ として，$u_i = v_i / \sqrt{i(i+1)}$

$$v_i = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \\ -i \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ \\ <i+1 \\ \\ \\ \\ \end{array}$$

であるから，

$$(4.\ 3) \qquad \mathbf{Z}_i = \langle u_i,\ \mathbf{X} \rangle = \frac{\mathbf{X}_1 + \cdots + \mathbf{X}_i - i\mathbf{X}_{i+1}}{\sqrt{i(i+1)}}, \qquad 1 \leq i \leq n-1$$

である。

あとがき

本論の執筆にあたり，東京大学農学部　高野泰氏から有益なご助言を得た。お礼申し上げる。

参　考　文　献

[1] 関本年彦「統計学で用いられる古典的分布関数」成城大学「経済研究」第118号1992年10月

[2] W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, vol. II, John Wiley & Sons, New York, 1971.

[3] C. R. Rao, *Linear Statistical Inference and Its Applications*, Second Edition, John Wiley & Sons, New York, 1973.

[4] A. Sen & M. Srivastava, *Regression Analysis*, Springer-Verlag New York Inc., 1990.