

補助資料 Z. 問題 A13 の証明について

この資料は、シュミットの直交化の正確な定義を用いて、問題 A12 の証明と共に問題 A13 の完全な証明をイメージすることを目的とする。

Z.1. シュミットの直交化

m 本のベクトル $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m\}$ に関する、シュミットの直交化の手順を以下に示す。

step1) $i = 1$ とする。 $j = 1$ とする。

(意味: i は、扱っているベクトルの番号で、 j は、一次独立なベクトルの番号。)

step2) 次の式を計算する。

(意味: 直交化している。内積がゼロになるようにしている。)

$$\mathbf{b}_j := \mathbf{a}_i - \sum_{k=1}^{j-1} (\mathbf{a}_i, \mathbf{c}_k) \mathbf{c}_k \quad (j = 1 \text{ の時は、 } \mathbf{b}_j := \mathbf{a}_i \text{ とせよ。})$$

step3) $\mathbf{b}_j = \mathbf{0}$ かどうか?

(意味: $\{\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_{j-1}, \mathbf{a}_i\}$ が一次従属かどうか?)

step3-1) $\mathbf{b}_j = \mathbf{0}$ ならば、 $i = i + 1$ として、 step2) に戻る。

step3-2) $\mathbf{b}_j \neq \mathbf{0}$ ならば、 step4) へ進む。

step4) $\mathbf{c}_j = \frac{\mathbf{b}_j}{|\mathbf{b}_j|}$, $j = j + 1$ とおき、 step5) へ進む。

(意味: 長さを 1 にしている。)

step5) $i = m$ かどうか?

step5-1) $i = m$ ならば、シュミットの直交化は終了する。

step5-2) $i < m$ ならば、 $i = i + 1$ として、 step2) に戻る。

Z.2. 参考: 問題 A12'

$$A, B \in O(n) \implies \exists P \in O(n), B = PA$$

【略証】: $A, B \in O(n)$ より、 $AA' = A'A = I_n$, $BB' = B'B = I_n$ である。ここで、 $P = BA'$ とおくと、 $PP' = (BA')(BA')' = BA'AB' = BB' = I_n$ ゆえ、 $P \in O(n)$. 【略証終】

Z.3. 参考: 問題 A12

$$A, B \in O(n \times m) \implies \exists P \in O(n), B = PA$$

【略証】: まず、 $A, B \in O(n \times m)$ より、列直交の定義から、以下の性質が成り立つ。

$$A'A = B'B = I_m$$

すなわち、 A, B の列ベクトルを、それぞれ $(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m)$, $(\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m)$ とおくと、 $A'A$ の (i, j) 要素は、クロネッカーのデルタ δ_{ij} であるから、 $\mathbf{a}'_i \mathbf{a}_j = \delta_{ij}$, 全く同様に、 $B'B$ の (i, j) 要素に関して、 $\mathbf{b}'_i \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$ が成り立つ。

ここで、 n 次元ベクトルの単位ベクトルを、 $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$ とおき、 $(\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_m)$ に加えた後、シュミットの直交化を行えば、最初の m 本は元の A の列ベクトルである行列 A^* ができ、これは直交行列となる。全く同様に、 B の列ベクトルに $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$ を加えてシュミットの直交化を行って B^* を作る。

最後に、問題 A12' より、 $B^* = PA^*$ となる P があり、この P は、 $B = PA$ を満たす。

【略証終】

Z.4. 参考：問題 A13

$$\left. \begin{array}{l} A, B : n \times m \\ A'A = B'B \end{array} \right\} \implies \exists P \in O(n), B = PA$$

【略証】 仮定より、 $A'A = B'B$ ゆえ、 $\mathbf{a}'_i \mathbf{a}_j = \mathbf{b}'_i \mathbf{b}_j (\forall i, \forall j)$ (Z.1)

A にシュミットの直交化を行い、極大一次独立な $A^* = (\mathbf{a}_{p_1}, \dots, \mathbf{a}_{p_t})$ を得るとする。

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{a}_{p_i} - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{(\mathbf{a}_{p_i}, \mathbf{d}_k)}{(\mathbf{d}_k, \mathbf{d}_k)} \mathbf{d}_k, \quad \mathbf{e}_i = \frac{\mathbf{d}_i}{|\mathbf{d}_i|} \quad (1 \leq \forall i \leq t),$$

$$\mathbf{e}'_i \mathbf{e}_j = \delta_{ij} \quad (\forall i, \forall j) \quad \dots\dots\dots (Z.2)$$

このとき、ある係数 $\lambda_{ik} (1 \leq k \leq i \leq t)$ があって、次が成り立つ。

$$\mathbf{e}_i = \sum_{k=1}^i \lambda_{ik} \mathbf{a}_{p_k}, \quad \lambda_{ii} \neq 0. \quad \dots\dots\dots (Z.3)$$

この係数 λ_{ik} を用いて、 $\mathbf{f}_i := \sum_{k=1}^i \lambda_{ik} \mathbf{b}_{p_k}$ とおくと、(Z.1),(Z.2) より、 $\mathbf{f}'_i \mathbf{f}_j = \mathbf{e}'_i \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$ ゆえ、 $F'F = E'E = I_t$. したがって、問題 A12 の仮定を満たすので、 $\exists P \in O(n)$ s.t. $F = PE$.

よって、 $\mathbf{f}_i = P\mathbf{e}_i (1 \leq \forall i \leq t)$. ゆえに、 $\sum_{k=1}^i \lambda_{ik} \mathbf{b}_{p_k} = P \left(\sum_{k=1}^i \lambda_{ik} \mathbf{a}_{p_k} \right) (1 \leq \forall i \leq t)$.

$$\therefore \sum_{k=1}^i \lambda_{ik} (\mathbf{b}_{p_k} - P\mathbf{a}_{p_k}) = \mathbf{0} \quad (1 \leq \forall i \leq t). \quad \dots\dots\dots (Z.4)$$

ここで、(Z.4) で、 $i = 1$ の場合に $\lambda_{11} \neq 0$ より、 $\mathbf{b}_{p_1} - P\mathbf{a}_{p_1} = \mathbf{0}$. これと (Z.4) で $i = 2$ の場合に $\lambda_{22} \neq 0$ より、 $\mathbf{b}_{p_2} - P\mathbf{a}_{p_2} = \mathbf{0}$. よって、帰納的に、以下が得られる。

$$\mathbf{b}_{p_k} - P\mathbf{a}_{p_k} = \mathbf{0} \quad (1 \leq \forall k \leq t). \quad \dots\dots\dots (Z.5)$$

一方、 $\{\mathbf{a}_{p_1}, \dots, \mathbf{a}_{p_t}\}$ の極大一次独立性より、次が成り立つ。

$$1 \leq \forall q \leq m, \exists (c_1, \dots, c_t) \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{a}_q = \sum_{k=1}^t c_k \mathbf{a}_{p_k}. \quad \dots\dots\dots (Z.6)$$

(Z.1) より、 $\left(\mathbf{b}_q - \sum_{k=1}^t c_k \mathbf{b}_{p_k} \right)' \left(\mathbf{b}_q - \sum_{k=1}^t c_k \mathbf{b}_{p_k} \right) = \left(\mathbf{a}_q - \sum_{k=1}^t c_k \mathbf{a}_{p_k} \right)' \left(\mathbf{a}_q - \sum_{k=1}^t c_k \mathbf{a}_{p_k} \right) = 0$

ゆえ、次の式が成り立つ。

$$\mathbf{b}_q = \sum_{k=1}^t c_k \mathbf{b}_{p_k} \quad (1 \leq \forall q \leq m). \quad \dots\dots\dots (Z.7)$$

よって、(Z.5) ~ (Z.7) より、 $\forall q$ に対して、 $\mathbf{b}_q = \sum_{k=1}^t c_k (P\mathbf{a}_{p_k}) = P \sum_{k=1}^t c_k \mathbf{a}_{p_k} = P\mathbf{a}_q$.

したがって、 $P \in O(n)$ で $B = PA$ が成り立つ。【略証終】

Def.C3. Z_1, \dots, Z_p i.i.d. $N(0, 1)$
 ならば、 $\mathbf{Z} = (Z_1, \dots, Z_p)'$ は p 次元標準正規分布に従うという。
 $\mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$ と表す。

Prop.C7. $\mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p) \implies E(\mathbf{Z}) = \mathbf{0}, \text{var}(\mathbf{Z}) = I_p$

Prop.C8. $\mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{Z}_1 \\ \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix} \begin{matrix} q \\ p-q \end{matrix} \implies \mathbf{Z}_1 \sim N_q(\mathbf{0}, I_q)$$

Prop.C9. $\mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$
 $\iff Z$ は、p.d.f. $(2\pi)^{-\frac{p}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\mathbf{z}'\mathbf{z}) =: \phi(\mathbf{z})$ を持つ。 ($\mathbf{z} \in R^p$)

⊙ $\prod_{i=1}^p \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}z_i^2} = (2\pi)^{-\frac{p}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\mathbf{z}'\mathbf{z})$

Prop.C10. $\left. \begin{matrix} \mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p) \\ P \in O(p) \end{matrix} \right\} \implies P'\mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$

⊙ $\mathbf{Y} := P'\mathbf{Z}$ の p.d.f. は
 $f(\mathbf{y}) = \phi(\mathbf{z}(\mathbf{y}))|J|, \quad J = \det\left(\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{y}}\right) : \text{ヤコビアン}$

$\mathbf{y} = P'\mathbf{z}$ より $\mathbf{z} = P\mathbf{y}$

$\therefore \mathbf{z}'\mathbf{z} = \mathbf{y}'\mathbf{y}. \quad J = \det(P) = \pm 1$

$\therefore f(\mathbf{y}) = (2\pi)^{-\frac{p}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\mathbf{y}'\mathbf{y}) = \phi(\mathbf{y})$

$\therefore \mathbf{Y} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$

系. $\left. \begin{matrix} \mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p) \\ P \in O(p \times q) \end{matrix} \right\} \implies P'\mathbf{Z} \sim N_q(\mathbf{0}, I_q)$

⊙ $\exists P_0 = \begin{bmatrix} P & P^* \end{bmatrix} \in O(p)$

$\mathbf{W}_0 := P_0'\mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$

\mathbf{W}_0 の最初の q 成分が $P'\mathbf{Z}$ であるから、Prop.C8. より $P'\mathbf{Z} \sim N_q(\mathbf{0}, I_q)$

Def.C4. $\boldsymbol{\mu} : p \times 1$, $\Sigma : p \times p$, 非負, $\text{rank}\Sigma = r$ とする。

$\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_p)'$ が p 次元正規分布 $N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ に従うとは

$$\exists \mathbf{Z} \sim N_r(\mathbf{0}, I_r), \quad \exists A : p \times r \quad \text{定数行列}$$

$$\text{s.t.} \quad \mathbf{X} = \boldsymbol{\mu} + A\mathbf{Z}, \quad \Sigma = AA'$$

[注意] この Def. は Def.C3. の拡張になっている。

即ち、Def.C4. において、 $\mathbf{X} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$ ならば

$$\exists \mathbf{Z} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p), \quad \exists A : p \times p \quad \text{定数行列}$$

$$\text{s.t.} \quad \mathbf{X} = A\mathbf{Z}, \quad I_p = AA'$$

第2式より、 $A \in O(p)$.

第1式と Prop.C10. より、 $\mathbf{X} \sim N_p(\mathbf{0}, I_p)$ となり、Def.C3. と矛盾していない。

$$\text{Prop.C11.} \quad \mathbf{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma) \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} E(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\mu} \\ \text{var}(\mathbf{X}) = \Sigma \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \textcircled{\odot} \quad E(\mathbf{X}) &= E(\boldsymbol{\mu} + A\mathbf{Z}) = \boldsymbol{\mu} + AE(\mathbf{Z}) = \boldsymbol{\mu} \\ \text{var}(\mathbf{X}) &= A\text{var}(\mathbf{Z})A' = AA' = \Sigma \end{aligned}$$

$$\text{Prop.C12.} \quad \left. \begin{array}{l} \mathbf{X} = \boldsymbol{\mu} + A\mathbf{Z} \\ \mathbf{Z} \sim N_r(\mathbf{0}, I_r) \\ A : p \times r, \Sigma = AA' \end{array} \right\} \Longrightarrow \mathbf{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$$

$\textcircled{\odot} \quad s := \text{rank}\Sigma = \text{rank}A$

A の特異分解を $A = P\rho Q'$ とする。

$$\mathbf{W} := Q'\mathbf{Z} \sim N_s(\mathbf{0}, I_s) \quad (\textcircled{\odot} \quad \text{Prop.C.10.系})$$

$$\mathbf{X} = \boldsymbol{\mu} + A\mathbf{Z} = \boldsymbol{\mu} + P\rho Q'\mathbf{Z} = \boldsymbol{\mu} + P\rho\mathbf{W}$$

$$(P\rho)(P\rho)' = AA' = \Sigma$$

ならば、Def.C4. より

$$\mathbf{X} \sim N_p(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$$

[注意] この Prop. が Def.C4. と違うのは

$$\text{rank}\Sigma = r$$

を要求していないことである。