

# スイープ演算子に関して

前川眞一

20080207, 20200512,0612,18,20c,0710,11,12,13,14,15,16,17,19,08 16

## 目次

1	スイープ演算子	1
1.1	定義	1
1.2	分割行列のスイープ	3
1.3	スイープ演算子を利用した様々な公式	4
1.4	細かい点	6
1.4.1	分割行列の逆行列の公式の証明	6
1.4.2	スイープの可逆性・可換性・加算性に関して	7
1.4.3	スイープ途中での行と列の入れ替えに関して	9
1.4.4	逆行列の生成	12
2	スイープ演算子の利用	13
2.1	線型モデルの2乗和の計算	13
2.1.1	線型モデルの積和行列	13
2.1.2	線型モデルの2乗和の計算	14

## 1 スイープ演算子

### 1.1 定義

スイープ演算子 (sweep operator) は Beaton(1964) により提案された演算子であり以下のように定義される。 $n \times n$  の行列  $A$  が

$$\mathbf{A} = \begin{matrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1i} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2i} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ii} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{ni} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \\ i \text{ 行} \\ i \text{ 列} \end{matrix} \quad (1)$$

として与えられている場合、行列  $A$  の第  $i, i$  要素によるスイープを  $\text{Swp}(A | i)$  と記し、それを以

下のように定義する。

$$\text{Swp}(\mathbf{A} | i) = \begin{bmatrix} a_{11} - a_{1i}a_{i1}/a_{ii} & a_{12} - a_{1i}a_{i2}/a_{ii} & \cdots & -a_{1i}/a_{ii} & \cdots & a_{1k} - a_{1i}a_{ik}/a_{ii} & \cdots & a_{1n} - a_{1i}a_{in}/a_{ii} \\ a_{21} - a_{2i}a_{i1}/a_{ii} & a_{22} - a_{2i}a_{i2}/a_{ii} & \cdots & -a_{2i}/a_{ii} & \cdots & a_{2k} - a_{2i}a_{ik}/a_{ii} & \cdots & a_{2n} - a_{2i}a_{in}/a_{ii} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{i1}/a_{ii} & a_{i2}/a_{ii} & \cdots & 1/a_{ii} & \cdots & a_{ik}/a_{ii} & \cdots & a_{in}/a_{ii} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{j1} - a_{ji}a_{i1}/a_{ii} & a_{j2} - a_{ji}a_{i2}/a_{ii} & \cdots & -a_{ji}/a_{ii} & \cdots & a_{jk} - a_{ji}a_{ik}/a_{ii} & \cdots & a_{jn} - a_{ji}a_{in}/a_{ii} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} - a_{ni}a_{i1}/a_{ii} & a_{n2} - a_{ni}a_{i2}/a_{ii} & \cdots & -a_{ni}/a_{ii} & \cdots & a_{nk} - a_{ni}a_{ik}/a_{ii} & \cdots & a_{nn} - a_{ni}a_{in}/a_{ii} \end{bmatrix}$$

すなわち行列  $\mathbf{A}$  の第  $i$  要素を自身の逆数で、対角を除く第  $i$  行を  $a_{ij}/a_{ii}$ ,  $j \neq i$  で、第  $i$  列を  $-a_{ij}/a_{ii}$ ,  $j \neq i$  で、それ以外の要素を  $a_{jk} - a_{ji}a_{ik}/a_{ii}$ ,  $j \neq i, k \neq i$  で置き換えている。

この演算子は、Goodnight (1979) によれば、最初に Ralston (1960) により紹介され、その後 Beaton (1964) に掲載されている彼の博士論文により Sweep Operator と命名されたい。なお、Ralston (1960) の発展版である Enslein, et al. (1977) では Ralston (1960) に関しては触れずに Beaton (1964) の命名による Sweep Operator として紹介されている。また、Beaton (1964), Dempster (1969) そして Enslein, et al. (1977) までの定義と、Goodnight (1979) の定義は微妙に異なっているが、ここでは Goodnight (1979) の定義を採用している。また、日本語の解説としては、新村秀一 (1983)、高橋行夫・芳賀敏郎 (1989)、前川眞一 (1997) 等がある。

このスイープ演算子は  $a_{ii} \neq 0$  の場合、可逆的

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} | i) | i) = \mathbf{A} \quad (2)$$

であり、また、各スイープにおいて分母となる対角要素 (ピボット) が 0 でない場合は可換的、すなわち、順序に依存しないこと

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} | i) | j) = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} | j) | i) \quad (3)$$

が知られている。また、一つの要素ではなく、複数の要素に関するスイープを

$$\text{Swp}(\mathbf{A} | i, j, \dots, k) = \text{Swp}(\cdots \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} | i) | j) \cdots | k) \quad (4)$$

と定義すると、ピボットが 0 でない限り、 $\text{Swp}(\mathbf{A} | i, j, \dots, k)$  はその順序に依存せずに、加算的である。

スイープ演算子を用いると、行列の逆行列を求めることが出来る。すなわち、 $n \times n$  の行列の全ての対角要素に関してスイープを行った結果

$$\text{Swp}(\mathbf{A} | 1, 2, \dots, n) = \text{Swp}(\cdots \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} | 1) | 2) \cdots | n) = \mathbf{A}^{-1} \quad (5)$$

は、ピボットが一度も 0 にならなければその行列の逆行列となる。

もしも、 $(i, i)$  番目のピボットが 0 となった場合には、 $i < j$  として、 $i$  行の第  $j$  番目の要素が 0 でない場合は  $i$  列と  $j$  列を、また、 $i$  列の第  $j$  番目の要素が 0 でない場合には  $i$  行と  $j$  行を交換してスイープを続けていけば良い。このように、可能な限り行や列を入れ替えることによりスイープを続けていき、最後まで 0 のピボットを避けられた場合、最終的に得られたスイープの結果を並べ替えば、それが  $\mathbf{A}$  の逆行列となっている。

また、このような行や列の入れ替えを行っても、第  $i$  番目のピボットが 0 となる場合は、第  $i$  行と第  $i$  列を全て 0 として次の  $(i + 1, i + 1)$  から計算を続けていくと、最終的に一般逆行列 (反射型一般逆行列) が得られる。

以下に  $2 \times 2$  の行列の例を示す。

$$\text{Swp} \left( \left[ \begin{array}{cc|c} a_{11} & a_{12} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & \end{array} \right] \right) = \left[ \begin{array}{cc|c} 1/a_{11} & a_{12}/a_{11} & \\ -a_{21}/a_{11} & a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11} & \end{array} \right] \quad [\text{invA2}] \quad (6)$$

$$\text{Swp} \left( \left[ \begin{array}{cc|c} 1/a_{11} & a_{12}/a_{11} & \\ -a_{21}/a_{11} & a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11} & \end{array} \right] \mid 2 \right) = \quad (7)$$

$$\left[ \begin{array}{cc|c} 1/a_{11} + a_{12}/a_{11} * a_{21}/a_{11} / (a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11}) & -a_{12}/a_{11} / (a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11}) & \\ -a_{21}/a_{11} / (a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11}) & 1 / (a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11}) & \end{array} \right] = \quad (8)$$

$$\frac{1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}} \left[ \begin{array}{cc} a_{22} & -a_{12} \\ a_{21} & a_{11} \end{array} \right] \quad (9)$$

## 1.2 分割行列のスイープ

$n \times n$  の行列  $A$  の分割を、

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \cdots & \mathbf{A}_{1i} & \cdots & \mathbf{A}_{1k} & \cdots & \mathbf{A}_{1G} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \mathbf{A}_{2i} & \cdots & \mathbf{A}_{2k} & \cdots & \mathbf{A}_{2G} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{i1} & \mathbf{A}_{i2} & \cdots & \mathbf{A}_{ii} & \cdots & \mathbf{A}_{ik} & \cdots & \mathbf{A}_{iG} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{j1} & \mathbf{A}_{j2} & \cdots & \mathbf{A}_{ji} & \cdots & \mathbf{A}_{jk} & \cdots & \mathbf{A}_{jG} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{G1} & \mathbf{A}_{G2} & \cdots & \mathbf{A}_{Gi} & \cdots & \mathbf{A}_{Gk} & \cdots & \mathbf{A}_{GG} \end{bmatrix} \quad (10)$$

とする。ただし、行列  $\mathbf{A}_{ij}, i = 1, 2, \dots, G, j = 1, 2, \dots, G$  は  $n_i \times n_j$  の行列で  $\sum_{i=1}^G n_i = n$  である。この場合、第  $i$  番目の対角ブロック  $\mathbf{A}_{ii}$  によるスイープ  $\text{Swp}(A \mid (i))$  を

$$\text{Swp}(A \mid (i)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{1i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i1} & \mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{1i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i2} & \cdots & -\mathbf{A}_{1i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} & \cdots & \mathbf{A}_{1k} - \mathbf{A}_{1i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{ik} & \cdots & \mathbf{A}_{1G} - \mathbf{A}_{1i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{iG} \\ \mathbf{A}_{21} - \mathbf{A}_{2i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i1} & \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{2i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i2} & \cdots & -\mathbf{A}_{2i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} & \cdots & \mathbf{A}_{2k} - \mathbf{A}_{2i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{ik} & \cdots & \mathbf{A}_{2G} - \mathbf{A}_{2i} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{iG} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i1} & \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i2} & \cdots & \mathbf{A}_{ii}^{-1} & \cdots & \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{ik} & \cdots & \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{iG} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{j1} - \mathbf{A}_{ji} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i1} & \mathbf{A}_{j2} - \mathbf{A}_{ji} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i2} & \cdots & -\mathbf{A}_{ji} \mathbf{A}_{ii}^{-1} & \cdots & \mathbf{A}_{jk} - \mathbf{A}_{ji} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{ik} & \cdots & \mathbf{A}_{jG} - \mathbf{A}_{ji} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{iG} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{A}_{G1} - \mathbf{A}_{Gi} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i1} & \mathbf{A}_{G2} - \mathbf{A}_{Gi} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{i2} & \cdots & -\mathbf{A}_{Gi} \mathbf{A}_{ii}^{-1} & \cdots & \mathbf{A}_{Gk} - \mathbf{A}_{Gi} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{ik} & \cdots & \mathbf{A}_{GG} - \mathbf{A}_{Gi} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{iG} \end{bmatrix} \quad [\text{PartSwep}]$$

と定義するが、これは、第  $i$  番目の行列の全ての対角要素に関するスイープに等しい。

$$\text{Swp}(A \mid (i)) = \text{Swp} \left( A \mid \sum_{j=1}^{i-1} n_j + 1, \sum_{j=1}^{i-1} n_j + 2, \dots, \sum_{j=1}^i n_j \right) \quad (12)$$

たとえば、行列が 2 分割されている場合には

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \\ -\mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \end{bmatrix} \quad [\text{sweepA1}] \quad (13)$$

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (2)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} & -\mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \\ \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22}^{-1} \end{bmatrix} \quad [\text{sweepA2}] \quad (14)$$

であり、行列が 3 分割されている場合には

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \\ -\mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{23} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \\ -\mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{32} - \mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (2)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} & -\mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} & \mathbf{A}_{13} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{23} \\ \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22}^{-1} & \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{23} \\ \mathbf{A}_{31} - \mathbf{A}_{32} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} & -\mathbf{A}_{32} \mathbf{A}_{22}^{-1} & \mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{32} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{23} \end{bmatrix} \quad (16)$$

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (3)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{13} \mathbf{A}_{33}^{-1} \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{13} \mathbf{A}_{33}^{-1} \mathbf{A}_{32} & -\mathbf{A}_{13} \mathbf{A}_{33}^{-1} \\ \mathbf{A}_{21} - \mathbf{A}_{23} \mathbf{A}_{33}^{-1} \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{23} \mathbf{A}_{33}^{-1} \mathbf{A}_{32} & -\mathbf{A}_{23} \mathbf{A}_{33}^{-1} \\ \mathbf{A}_{33}^{-1} \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{33}^{-1} \mathbf{A}_{32} & \mathbf{A}_{33}^{-1} \end{bmatrix} \quad (17)$$

となる。可逆性、可換性や加算性等の性質は分割行列の場合も同様であり、

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (i)) \mid (i)) = \mathbf{A} \quad (18)$$

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (i)) \mid (j)) = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (j)) \mid (i)) \quad (19)$$

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (i, j, \dots, k)) = \text{Swp}(\dots \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (i)) \mid (j)) \dots \mid (k)) \quad (20)$$

である。なお、左辺を  $\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (i), (j), \dots, (k))$  と記すこともある。

### 1.3 スイープ演算子を利用した様々な公式

スイープ演算子の性質を用いて様々な行列演算の公式を導出することが出来る。例えば、2 分割の行列の逆行列を求めるためには

$$\mathbf{A}^{-1} = \text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1, 2) \mid (=)) \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2)) = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (2)) \mid (1)) \quad [\text{sweepinvA}]$$

という 3 通りの方法が考えられるが、この最後の二つのスイープの結果  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2))$  と  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (2)) \mid (1))$  を書き下せば

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & -\mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \\ -\mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \end{bmatrix} \quad [\text{invAp1}] \quad (22)$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11.2}^{-1} & -\mathbf{A}_{11.2}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \\ -\mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11.2}^{-1} & \mathbf{A}_{22}^{-1} + \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11.2}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \end{bmatrix} \quad [\text{invAp2}] \quad (23)$$

となるが、これは、分割行列の逆行列の公式として知られているものである。ただし、残差積和行列 (residual sum of squares and cross-product matrix) を

$$\mathbf{A}_{ii.j} = \mathbf{A}_{ii} - \mathbf{A}_{ij} \mathbf{A}_{jj}^{-1} \mathbf{A}_{ji} \quad [\text{Aiidotj}] \quad (24)$$

とれている。なお、ここで残差積和行列と呼んでいるものは、分割行列  $\mathbf{A}$  の  $\mathbf{A}_{ii}$  に関するシュール補行列 (Schur Complement) と呼ばれるものである。

Eq.(22) [invAp1] と Eq.(23) [invAp2] を比べることにより残差積和行列の逆行列

$$\mathbf{A}_{ii.j}^{-1} = \mathbf{A}_{ii}^{-1} + \mathbf{A}_{ii}^{-1} \mathbf{A}_{ij} \mathbf{A}_{jj.i}^{-1} \mathbf{A}_{ji} \mathbf{A}_{ii}^{-1} \quad (25)$$

を得る。また、残差積和行列の逆行列公式において、

$$\mathbf{A}_{ii} \rightarrow \mathbf{A}, \mathbf{A}_{ij} \rightarrow \mathbf{B}, -\mathbf{A}_{jj.i}^{-1} \rightarrow \mathbf{C}, \mathbf{A}_{ji} \rightarrow \mathbf{D} \quad (26)$$

とおけば、Woodburry-Lindley-Smith の公式

$$(\mathbf{A} + \mathbf{BCD})^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} (\mathbf{C}^{-1} + \mathbf{DA}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{DA}^{-1} \quad (27)$$

を得る。また、 $\mathbf{A}_{12} = \mathbf{O}$  とおくと **下三角行列の逆行列**

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{O} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{O} \\ -\mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22}^{-1} \end{bmatrix} \quad (28)$$

を得る。

また、スワイプ演算子を用いて逆行列を求める際に現れるピボットを掛け合わせたものが、また、分割行列の場合には、ピボットとなる行列の行列式を掛け合わせたものが、元の行列の **行列式** となることが知られている。

たとえば、 $2 \times 2$  の行列の場合、Eq.(6) [invA2] よりピボットは  $a_{11}$  と  $a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11}$  であるため

$$\left| \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \right| = a_{11} \times (a_{22} - a_{21} * a_{12}/a_{11}) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \quad (29)$$

となる。また、 $2 \times 2$  の分割行列の逆行列を Eq.(21) [sweepinvA] の  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2))$  を用いて計算する際には、最初のピボットが  $\mathbf{A}_{11}$ 、その結果として得られる行列が Eq.(13) [sweepA1] であるから、2番目のピボットは  $\mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}$  となる。したがって、この行列の行列式は、

$$|\mathbf{A}| = |\mathbf{A}_{11}| \times |\mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}| \quad (30)$$

となる。同様に  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (2)) \mid (1))$  を用いた場合は

$$|\mathbf{A}| = |\mathbf{A}_{22}| \times |\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22}^{-1} \mathbf{A}_{21}| \quad (31)$$

となり、この二つは同値である。したがって、 $r \times c$  の行列  $\mathbf{P}$  と  $c \times r$  の行列  $\mathbf{Q}$  に関して以下の公式を得る。

$$|\mathbf{I}_r - \mathbf{PQ}| = |\mathbf{I}_c - \mathbf{QP}| \quad (32)$$

行列式に関しては以下の演算規則が成り立つ。ただし、全ての行列はそのサイズが  $r$  の正方行列とする。

$$|\mathbf{AB}| = |\mathbf{A}| \times |\mathbf{B}| = |\mathbf{BA}| \quad (33)$$

$$\left| \mathbf{A}^{-1} \right| = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \quad (34)$$

$$|\lambda \mathbf{A}| = \lambda^r |\mathbf{A}| \quad \text{and} \quad |\mathbf{A}| = |\mathbf{A}'| \quad (35)$$

## 1.4 細かい点

### 1.4.1 分割行列の逆行列の公式の証明

Eq.(22) [invAp1] を用いて  $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}$  と  $\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}$  を計算し、それらが単位行列になることを示す。

$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}$  の各要素：

$$\left[\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\right]_{11} = \left(\mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\right)\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} \quad (36)$$

$$= \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{11} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} \quad (37)$$

$$= \mathbf{I} + \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} = \mathbf{I} \quad (38)$$

$$\left[\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\right]_{12} = \left(\mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\right)\mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{22} \quad (39)$$

$$= \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} + \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{22} \quad (40)$$

$$= \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} + \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\left(\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{22}\right) \quad (41)$$

$$= \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{22.1} \quad (42)$$

$$= \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} = \mathbf{O} \quad (43)$$

$$\left[\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\right]_{21} = \left(-\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\right)\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} \quad (44)$$

$$= -\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{11} + \mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} \quad (45)$$

$$= -\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} + \mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21} = \mathbf{O} \quad (46)$$

$$\left[\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\right]_{22} = \left(-\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\right)\mathbf{A}_{12} + \mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{22} \quad (47)$$

$$= -\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} + \mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{22} \quad (48)$$

$$= \mathbf{A}_{22.1}^{-1}\left(-\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12} + \mathbf{A}_{22}\right) \quad (49)$$

$$= \mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{22.1} = \mathbf{I} \quad (50)$$

$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}$  の各要素：

$$\left[\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\right]_{11} = \mathbf{A}_{11}\left(\mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1}\right) - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} \quad (51)$$

$$= \mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{11}\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} \quad (52)$$

$$= \mathbf{I} + \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} - \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} = \mathbf{I} \quad (53)$$

$$\left[\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\right]_{12} = -\mathbf{A}_{11}\left(\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1}\right) + \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1} \quad (54)$$

$$= -\mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1} + \mathbf{A}_{12}\mathbf{A}_{22.1}^{-1} = \mathbf{O} \quad (55)$$

$$\left[ \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} \right]_{21} = \mathbf{A}_{21} \left( \mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \right) - \mathbf{A}_{22} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \quad (56)$$

$$= \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} - \mathbf{A}_{22} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \quad (57)$$

$$= \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} + \left( \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} - \mathbf{A}_{22} \right) \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \quad (58)$$

$$= \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} + (-\mathbf{A}_{22.1}) \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \quad (59)$$

$$= \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} = \mathbf{O} \quad (60)$$

$$\left[ \mathbf{A} \mathbf{A}^{-1} \right]_{22} = -\mathbf{A}_{21} \left( \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \right) + \mathbf{A}_{22} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \quad (61)$$

$$= \left( -\mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} + \mathbf{A}_{22} \right) \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \quad (62)$$

$$= \mathbf{A}_{22.1} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} = \mathbf{I} \quad (63)$$

**End of Proof**

Eq.(23)[invAp2] に関しても同様に、Eq.(24)[Aiidotj] に相当するものを作る形で式を変形していけば証明することが出来る。

#### 1.4.2 スイープの可逆性・可換性・加算性に関して

##### 1.4.2.1 スイープの可逆性

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (i)) \mid (i)) = \mathbf{A} \quad (64)$$

を示すのは簡単。

##### 1.4.2.2 スイープの可換性

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2)) = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (2)) \mid (1)) \quad (65)$$

これは、Woodburry-Lindley-Smith の公式を用いれば簡単。それが嫌なら、フルランクの仮定の下に、

$$\mathbf{A} \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2)) = \mathbf{A} \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (2)) \mid (1)) = \mathbf{I} \quad (66)$$

を示せば良い。(左辺は分割行列の逆行列の公式の証明と同じ。)

##### 1.4.2.3 スイープの加算性：連続スイープ

$\mathbf{A}$  を、一般性を失わずに、 $3 \times 3$  の分割行列とすると

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2)) = \text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1, 2)) \quad [\text{ContSweep}] \quad (67)$$

である。左辺は  $\mathbf{A}$  行列をブロック 1 でスイープしたもの  $\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1))$  をその第 2 ブロック  $\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1))[2:2]$  で再度スイープしたものである。ただし、 $\mathbf{B}$  を任意の行列として  $\mathbf{B}[a:b, c:d]$  で

$B$  行列の第  $a$  行から  $b$  行と第  $c$  列から  $d$  列で構成される  $(b-a+1) \times (d-c+1)$  の小行列を示すものとする。したがって、その結果は

$$\begin{aligned} & \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2)) = \\ & \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & -\mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} - \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} \\ -\mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22.1}^{-1} & \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} \\ -\mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{32.1} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & -\mathbf{A}_{32.1} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} & \mathbf{A}_{33.1} - \mathbf{A}_{32.1} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad \text{[SSA12]} \quad (68)$$

であり、その第 1 ブロックと第 2 ブロックからなる部分は、分割行列の逆行列の公式から、 $\mathbf{A}[1:2, 1:2]^{-1}$  である。また、右辺は  $\mathbf{A}$  行列をブロック 1 と 2 をまとめて一回だけスイープしたものであるため、まとめたブロックを  $\mathbf{A}_{cc}$  と置くと

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1, 2)) = \text{Swp}(\mathbf{A} \mid (c)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{cc}^{-1} & \mathbf{A}_{cc}^{-1} \mathbf{A}_{c3} \\ -\mathbf{A}_{3c} \mathbf{A}_{cc}^{-1} & \mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{3c} \mathbf{A}_{cc}^{-1} \mathbf{A}_{c3} \end{bmatrix} \quad \text{[SA12]} \quad (69)$$

である。なお、これは  $2 \times 2$  の分割行列であるが、その第 2 行と第 2 列が  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2))$  の第 3 行と第 3 列に対応することになる。

Eq.(67) [ContSweep] を言うためには、Eq.(68) [SSA12] と Eq.(69) [SA12] が等しいことを言えば良いが、定義により

$$\mathbf{A}_{cc}^{-1} = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2))[1:2:1:2] \quad (70)$$

であるため、示すべき等式は

$$\mathbf{A}_{cc}^{-1} \mathbf{A}_{c3} = \mathbf{A}_{cc}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{13} \\ \mathbf{A}_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} - \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} \\ \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} \end{bmatrix} \quad \text{[eq1]} \quad (71)$$

$$-\mathbf{A}_{3c} \mathbf{A}_{cc}^{-1} = -[\mathbf{A}_{31} \quad \mathbf{A}_{32}] \mathbf{A}_{cc}^{-1} \quad (72)$$

$$= \begin{bmatrix} -\mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} + \mathbf{A}_{32.1} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & -\mathbf{A}_{32.1} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \end{bmatrix} \quad \text{[eq2]} \quad (73)$$

$$\mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{3c} \mathbf{A}_{cc}^{-1} \mathbf{A}_{c3} = \mathbf{A}_{33.1} - \mathbf{A}_{32.1} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} \quad \text{[eq3]} \quad (74)$$

である。以下にそれを示す。

Eq.(71) [eq1] の左辺の第 1 行は  $\mathbf{A}_{cc}^{-1}$  に Eq.(22) [invAp1] を代入し Eq.(24) [Aiidotj] を用いると、以下ようになる。

$$\text{左辺第 1 行} = \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} + \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} - \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23} \quad (75)$$

$$= \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} + \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} (\mathbf{A}_{23} - \mathbf{A}_{23.1}) - \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23} \quad (76)$$

$$= \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} - \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} = \text{右辺第 1 行} \quad (77)$$

同様に Eq.(71) [eq1] の左辺第 2 行は

$$\text{左辺第 2 行} = -\mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} + \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23} \quad (78)$$

$$= \mathbf{A}_{22.1}^{-1} (-\mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} + \mathbf{A}_{23}) \quad (79)$$

$$= \mathbf{A}_{22.1}^{-1} \mathbf{A}_{23.1} = \text{右辺第 2 行} \quad (80)$$

となる。また、Eq.(73) [eq2] に関しても同様の操作で左辺と右辺が等しいことが言える。



最後に Eq.(74) [eq3] であるが、左辺の  $A_{cc}^{-1}$  に Eq.(22) [invAp1] を代入したものと、右辺の  $A_{32.1}$  を展開したものを比較すると以下のようになり、両辺は等しいことが分かる。

$$\text{左辺} = A_{33} - A_{31}A_{11}^{-1}A_{13} \quad (81)$$

$$-A_{31}A_{11}^{-1}A_{12}A_{22.1}^{-1}A_{21}A_{11}^{-1}A_{13} \quad (82)$$

$$+A_{32}A_{22.1}^{-1}A_{21}A_{11}^{-1}A_{13} \quad (83)$$

$$+A_{31}A_{11}^{-1}A_{12}A_{22.1}^{-1}A_{23} \quad (84)$$

$$-A_{32}A_{22.1}^{-1}A_{23} \quad (85)$$

$$\text{右辺} = A_{33.1} - A_{32}A_{22.1}^{-1}A_{23} \quad (86)$$

$$+A_{32}A_{22.1}^{-1}A_{21}A_{11}^{-1}A_{13} \quad (87)$$

$$+A_{31}A_{11}^{-1}A_{12}A_{22.1}^{-1}A_{23} \quad (88)$$

$$-A_{31}A_{11}^{-1}A_{12}A_{22.1}^{-1}A_{21}A_{11}^{-1}A_{13} \quad (89)$$

#### 1.4.3 スイープ途中での行と列の入れ替えに関して

行と列を入れ替えながらスイープを行っても最終的に  $A$  に逆行列や一般逆行列が得られること示すためには以下の二つの性質が成立することを示せば良い。

すなわち、 $a : b$  を  $a$  から  $b$  までの整数を全て並べたものを示す記法として、 $R_{ij}$  を行  $i$  と  $j$ 、ただし  $i < j$ 、を交換するための交換行列、 $C_{ij}$  を列  $i$  と  $j$  を交換するための交換行列として

$$\text{Swp} ( R_{ij} \text{Swp} ( A \mid 1 : (i-1) ) C_{ij} \mid i, i+1, \dots ) = \text{Swp} ( R_{ij} A C_{ij} \mid 1 : i, i+1, \dots ) \quad [\text{switchrule0}]$$

かつ

$$\text{Swp} ( A \mid 1 : j, j+1, \dots ) = C_{ij} \text{Swp} ( R_{ij} A C_{ij} \mid 1 : j, j+1, \dots ) R_{ij} \quad [\text{switchrule1}]$$

が成立することを示す。

	1	2	3	4	5	6
1						
2						
3						
4						
5						
6						

Figure1 スイープ途中での行と列の入れ替え [switch]

Figure 2 [switch] はスイープ途中での行と列の入れ替えを行う場合の模式図である。 $i = 3, j = 5$  として、 $\text{Swp} ( A \mid 1 : 2 )$  が終了した段階で次のピボットとなるべき  $(3,3)$  要素、すなわち  $\text{Swp} ( A \mid 1 : 2 ) [3,3]$  が 0 となったとして  $\text{Swp} ( A \mid 1 : 2 )$  の第 3 列と第 5 列を入れ替えてス

イープを続けていく様子である。この入れ替え行列を  $C_{35}$  とすれば、図中の灰色部分で示される (3,3) から (5,5) 要素までのスイープは  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1:2) C_{35} \mid 3:5)$  と書ける。

しかし、 $C_{35}$  を右から掛けることは  $\mathbf{A}$  の第 3 列と第 5 列以外には影響を与えないため、

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1:2) C_{35} = \text{Swp}(\mathbf{A} C_{35} \mid 1:2) \quad (92)$$

である。

このことは、 $\mathbf{A}$  行列の行と列を 1-2, 3-5, 6 と分割したものを

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{13} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \mathbf{A}_{23} \\ \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{32} & \mathbf{A}_{33} \end{bmatrix} \quad (93)$$

ただし、 $\mathbf{A}_{11} = \mathbf{A}[1:2, 1:2]$ ,  $\mathbf{A}_{22} = \mathbf{A}[3:5, 3:5]$ ,  $\mathbf{A}_{33} = \mathbf{A}[6, 6], \dots$ 、として、分割行列のスイープを用いて説明すると分かりやすい。この場合、

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \\ -\mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{23} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \\ -\mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{32} - \mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} & \mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \end{bmatrix} \quad (94)$$

[matSweep3 - 1]

である。いま、 $C_{35}$  行列も同様に分割し、その第 3-5 行と第 3-5 列からなる行列を  $C_{35}^* \equiv C_{35}[3:5, 3:5]$  とすれば、これはブロック対角行列となり、 $C_{35}^*$  以外の対角ブロックは単位行列となっている。したがって、分割された  $\mathbf{A}$  行列に右から  $C_{35}$  を掛けるということはその第 2 列ブロックを  $C_{35}^*$  倍すること

$$\mathbf{A} C_{35} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} C_{35}^* & \mathbf{A}_{13} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} C_{35}^* & \mathbf{A}_{23} \\ \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{32} C_{35}^* & \mathbf{A}_{33} \end{bmatrix} \quad [\text{AC35}] \quad (95)$$

であるため、 $\mathbf{A} C_{35}$  行列をその最初の二つのピボット (1,1) と (2,2) でスイープしたもの、すなわち、 $\mathbf{A}_{11}$  でスイープしたもの、 $\text{Swp}(\mathbf{A} C_{35} \mid (1))$  は、Eq.(94) [matSweep3-1] においてその  $\mathbf{A}_{12}, \mathbf{A}_{22}, \mathbf{A}_{32}$  を  $\mathbf{A}_{12} C_{35}^*, \mathbf{A}_{22} C_{35}^*, \mathbf{A}_{32} C_{35}^*$  に置き換えて得られる

$$\text{Swp}(\mathbf{A} C_{35} \mid (1)) = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} C_{35}^* & \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \\ -\mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{22} C_{35}^* - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} C_{35}^* & \mathbf{A}_{23} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \\ -\mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{A}_{32} C_{35}^* - \mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12} C_{35}^* & \mathbf{A}_{33} - \mathbf{A}_{31} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{13} \end{bmatrix} \quad (96)$$

となるが、これは、 $\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) C_{35}$  に等しい。

したがって、結局、 $\mathbf{A}$  行列の (1,1) から (3,3) までのスイープに関して、

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) C_{35} \mid (2)) = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} C_{35} \mid (1)) \mid (2)) \quad (97)$$

$$= \text{Swp}(\mathbf{A} C_{35} \mid (1), (2)) \quad (98)$$

である。すなわち、途中で列を入れ替えて (5,5) までスイープを行ったものは、最初から列を入れ替えて (5,5) までスイープを行ったものに等しい。

より一般的には、

$$\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1:(i-1))\mathbf{C}_{ij} = \text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij} \mid 1:(i-1)), \quad i < j \quad (99)$$

であり、この両辺のスイープを続けて行ったものは等しく、またスイープの加算性から

$$\begin{aligned} \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1:(i-1))\mathbf{C}_{ij} \mid i, i+1, \dots) &= \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij} \mid 1:(i-1)) \mid i, i+1, \dots) \\ &= \text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij} \mid 1, 2, \dots) \quad [\text{SAC}] \end{aligned} \quad (100)$$

という結果を得る。すなわち、第  $i$  目のスイープに於いて第  $i$  列と  $j$  列を入れ替えてスイープを続けたものは、最初から第  $i$  列と  $j$  列を入れ替えたもののスイープに等しい。

同様に、行の入れ替えに関しても、 $\mathbf{R}_{ij}$  が  $\mathbf{A}$  行列の第  $i$  行と  $j$  行以外には影響を与えないこと、 $\mathbf{R}_{ij}$  を  $\mathbf{A}$  の左から掛けることがその第  $i$  行ブロックに  $\mathbf{R}_{ij}^*$  を掛けることに等しいことを考慮すれば、

$$\begin{aligned} \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{R}_{ij}\mathbf{A} \mid 1:(i-1)) \mid i, i+1, \dots) &= \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{R}_{ij}\mathbf{A} \mid 1:(i-1)) \mid i, i+1, \dots) \\ &= \text{Swp}(\mathbf{R}_{ij}\mathbf{A} \mid 1, 2, \dots) \quad [\text{SRA}] \end{aligned} \quad (101)$$

である。

したがって、再度、第  $k$  番目のスイープに於いて第  $k$  列と  $\ell$  列を入れ替える場合は、 $i < j, i < k < \ell$  として、Eq.(100)[SAC] を再帰的に使うと

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1:(i-1))\mathbf{C}_{ij} \mid i:(k-1))\mathbf{C}_{k\ell} \mid k, k+1, \dots) = \quad (102)$$

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij} \mid 1:(k-1))\mathbf{C}_{k\ell} \mid k, k+1, \dots) = \quad (103)$$

$$\text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell} \mid 1, 2, \dots) \quad [\text{SACC}] \quad (104)$$

であり、ピボットが  $n-1$  の時点まで何度でも入れ替えが可能である。

同様に、行の入れ替えに関しても

$$\text{Swp}(\mathbf{R}_{k\ell}\text{Swp}(\mathbf{R}_{ij}\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1:(i-1)) \mid i:(k-1)) \mid k, k+1, \dots) = \quad (105)$$

$$\text{Swp}(\mathbf{R}_{k\ell}\mathbf{R}_{ij}\mathbf{A} \mid 1, 2, \dots) \quad [\text{SRRA}] \quad (106)$$

である。

また、逆行列に関しては、Eq.(104)[SACC] においてスイープの範囲が、 $1, 2, \dots, \ell$  の場合は、すなわち、現在までの全ての列の入れ替え範囲の最後までスイープする場合には

$$\text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell} \mid 1:\ell)[1:\ell 1:\ell] = (\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell}[1:\ell 1:\ell])^{-1} \quad (107)$$

$$= \mathbf{C}_{ij}^* \mathbf{C}_{k\ell}^* (\mathbf{A}[1:\ell 1:\ell])^{-1} \quad (108)$$

である。したがって、列の入れ替えを繰り返しながら最終的に  $n$  までのスイープを終えた時点では

$$\text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell}\dots \mid 1, 2, \dots, n) = (\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell}\dots)^{-1} \quad (109)$$

$$= \mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell}\dots\mathbf{A}^{-1} \quad (110)$$

となるため、

$$\mathbf{A}^{-1} = \dots \mathbf{C}_{k\ell}\mathbf{C}_{ij}\text{Swp}(\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell}\dots \mid 1, 2, \dots, n) \quad (111)$$

を得る。

また、行の入れ替えと列の入れ替えが混在する場合には

$$\mathbf{A}^{-1} = \dots \mathbf{C}_{k\ell}\mathbf{C}_{ij}\text{Swp}(\dots \mathbf{R}_{k'\ell'}\mathbf{R}_{i'j'}\mathbf{A}\mathbf{C}_{ij}\mathbf{C}_{k\ell}\dots \mid 1, 2, \dots, n)\mathbf{R}_{i'j'}\mathbf{R}_{k'\ell'} \dots \quad (112)$$

である。

#### 1.4.4 逆行列の生成

$$\mathbf{A}^{-1} = \text{Swp}(\dots(\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1)) \mid (2)) \mid \dots) \mid (n)) \quad (113)$$

の証明

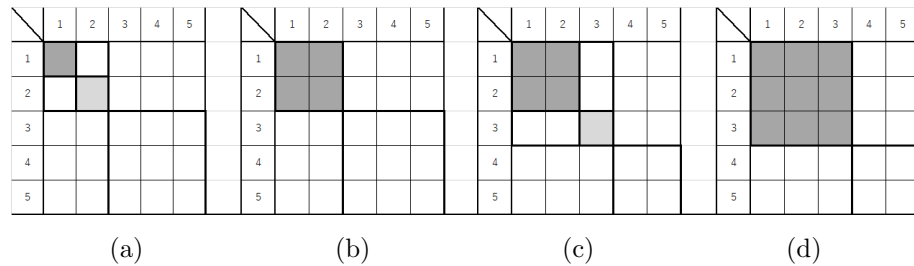


Figure2 逆行列の計算 [switch]

以下の記述では、ブロックに関する添字は本来は括弧に入れるものであるが、ここでは見にくくなるのでそれを省略する。 $\mathbf{A}$  行列をブロック 1 ( $\mathbf{A}_{11}$ ) でスワイプした後にそのスワイプ結果のブロック 2 (2 行 2 列部分) でスワイプしたものを  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1) \mid 2)$  の第 1 ブロックと第 2 ブロック部分  $\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1) \mid 2)[1:2, 1:2]$  は、分割行列の公式から

$$\mathbf{A}[1:2, 1:2]^{-1} = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1) \mid 2)[1:2, 1:2] \quad (114)$$

である。すなわち、ブロック 1 とブロック 2 の二つのブロックで連続的にスワイプする事により、元に行列のブロック 1 とブロック 2 の部分の逆行列を得る。(これが、分割行列の逆行列の公式の本質である。) なお、当然であるが、それ以外のブロックに於いても、スワイプ演算子の操作は行われている。(Figure 2 [switch] の (a) の状態で 第 1 行第 3-5 列、第 3-5 行第 3-5 列等にも変化している。)

しかし、スワイプの加算性から

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1) \mid 2) = \text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1, 2)) \quad (115)$$

すなわち、ブロック 1 でスワイプした後にブロック 2 でスワイプしたものは、ブロック 1 と 2 を一つのブロックと見做して一回だけスワイプしたものに等しい。したがって先ほどのスワイプをブロック 3 まで続けたものは以下のように二つのブロック、すなわち、ブロック 1-2 とブロック 3 に関する二回の連続スワイプの形で書くことが出来る。(Figure 2 [switch] の (c) と (d) を参照のこと。)

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1) \mid 2) \mid 3) = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1, 2)) \mid 3) \quad (116)$$

したがって、分割行列の逆行列の公式により

$$\mathbf{A}[1:3, 1:3]^{-1} = \text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid (1, 2)) \mid 3)[1:3, 1:3] \quad (117)$$

$$= \text{Swp}(\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{A} \mid 1) \mid 2) \mid 3)[1:3, 1:3] \quad (118)$$

である。

すなわち、 $A$  行列をその第 1 ブロックから第 3 ブロックまで順次スイープしていくことにより、 $A$  行列の第 3 ブロックまでの逆行列を得る。そして、これを最終ブロックまで続けていくことにより、 $A$  の逆行列を得る。

## 2 スイープ演算子の利用

### 2.1 線型モデルの 2 乗和の計算

#### 2.1.1 線型モデルの積和行列

$N \times n$  の行列  $X$  が

$$X = \{X_1, X_2, X_3\} \quad (119)$$

と分割されているとする。ただし、それぞれの行列のサイズを  $N \times n_j$  とする。これから以下のように積和行列を作り

$$S = X'X = \begin{bmatrix} X_1'X_1 & X_1'X_2 & X_1'X_3 \\ X_2'X_1 & X_2'X_2 & X_2'X_3 \\ X_3'X_1 & X_3'X_2 & X_3'X_3 \end{bmatrix} \quad (120)$$

その第 1,1 要素でスイープすると、以下ようになる。

$$\text{Swp}(S \mid (1)) = \begin{bmatrix} (X_1'X_1)^{-1} & (X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2 & (X_1'X_1)^{-1}X_1'X_3 \\ -X_2'X_1(X_1'X_1)^{-1} & X_2'X_2 - X_2'X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2 & X_2'X_3 - X_2'X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_3 \\ -X_3'X_1(X_1'X_1)^{-1} & X_3'X_2 - X_3'X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2 & X_3'X_3 - X_3'X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_3 \end{bmatrix} \quad (121)$$

ここで、右下部分に現れる行列に注目すると、それらは

$$S_{jk,i} = X_j'X_k - X_j'X_i(X_i'X_i)^{-1}X_i'X_k = X_j'(I - X_i(X_i'X_i)^{-1}X_i')X_k = X_j'Q(X_i)X_k \quad (122)$$

と書くことができる。ただし、

$$P(X_i) = X_i(X_i'X_i)^{-1}X_i' \quad \text{and} \quad Q(X_i) = I - X_i(X_i'X_i)^{-1}X_i' = I - P(X_i) \quad (123)$$

は、それぞれ、 $X_i$  の列ベクトルで張られる空間 ( $X_i$  の列空間) への射影子とその直交補空間への射影子と呼ばれるものであり、対称かつ冪等

$$P(X_i) = P(X_i)', P(X_i)^2 = P(X_i), Q(X_i) = Q(X_i)', Q(X_i)^2 = Q(X_i) \quad (124)$$

という性質を持つ。

したがって、 $\text{Swp}(S \mid (1))$  行列の右下の  $2 \times 2$  のブロックは、以下のようにかける。

$$\text{Swp}(S \mid (1))[2:3, 2:3] = \begin{bmatrix} X_2'Q(X_1)X_2 & X_2'Q(X_1)X_3 \\ X_3'Q(X_1)X_2 & X_3'Q(X_1)X_3 \end{bmatrix} \quad (125)$$

が、これは  $Q(X_i)$  行列の対称かつ冪等の性質を利用すると、

$$\begin{bmatrix} Q(X_1)X_2 & Q(X_1)X_3 \end{bmatrix} \quad (126)$$

から計算した積和行列

$$\begin{bmatrix} X_2'Q(X_1) \\ X_3'Q(X_1) \end{bmatrix} [ Q(X_1)X_2 \quad Q(X_1)X_3 ] = \begin{bmatrix} X_2'Q(X_1)X_2 & X_2'Q(X_1)X_3 \\ X_3'Q(X_1)X_2 & X_3'Q(X_1)X_3 \end{bmatrix} \quad (127)$$

であると考えられる。

このことは以下のことと同値である。Swp(  $S \mid (1)$  ) [2:3, 2:3] は  $X_{(1)} = [X_2, X_3]$  を  $X_1$  に回帰した時の残差  $Z_{(1)} = X_{(1)} - X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'X_{(1)} = Q(X_1)X_{(1)}$  から計算した積和行列  $Z_{(1)}'Z_{(1)}$  が入る。

### 2.1.2 線型モデルの2乗和の計算

回帰分析において説明変数行列が  $G$  群に分割されるものとする。

$$X = \{X_1, X_2, \dots, X_G\} \quad (128)$$

ただし、それぞれの行列のサイズを  $N \times n_j$  とする。

この説明変数行列の最後に、基準変数  $y$  を付け加えたもの

$$Z = \{X, y\} \quad (129)$$

の積和行列 ( $G+1 \times G+1$  の分割行列で拡大積和行列と呼ぶ) を

$$S = \begin{bmatrix} X_1'X_1 & \cdots & X_1'X_i & \cdots & X_1'X_G & X_1'y \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_i'X_1 & \cdots & X_i'X_i & \cdots & X_i'X_G & X_i'y \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_G'X_1 & \cdots & X_G'X_i & \cdots & X_G'X_G & X_G'y \\ y'X_1 & \cdots & y'X_i & \cdots & y'X_G & y'y \end{bmatrix} \begin{matrix} i \text{ 行} \\ \\ \\ \\ \\ i \text{ 列} \end{matrix} \quad (130)$$

とする。

拡大積和行列をその第  $i$  対角ブロックでスワイプしたもの Swp(  $S \mid (i)$  ) は、その定義から、以下のようになる。

$$\text{Swp}(S \mid (i)) = \begin{bmatrix} X_1'Q(X_i)X_1 & \cdots & -X_1'X_i(X_i'X_i)^{-1} & \cdots & X_1'Q(X_i)X_G & X_1'Q(X_i)y \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ (X_i'X_i)^{-1}X_i'X_1 & \cdots & (X_i'X_i)^{-1} & \cdots & (X_i'X_i)^{-1}X_i'X_G & (X_i'X_i)^{-1}X_i'y \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_G'Q(X_i)X_1 & \cdots & -X_G'X_i(X_i'X_i)^{-1} & \cdots & X_G'Q(X_i)X_G & X_G'Q(X_i)y \\ y'Q(X_i)X_1 & \cdots & -y'X_i(X_i'X_i)^{-1} & \cdots & y'Q(X_i)X_G & y'Q(X_i)y \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ i \text{ 行} \\ \\ \\ i \text{ 列} \end{matrix} \quad (131)$$

すなわち Swp(  $S \mid (i)$  ) は第  $i$  対角ブロックに  $(X_i'X_i)^{-1}$  を、対角ブロックを除く第  $i$  行に  $X_j$ ,  $j \neq 1$  や  $y$  を  $X_i$  に回帰したときの回帰係数行列  $(X_i'X_i)^{-1}X_i'X_j$  と  $(X_i'X_i)^{-1}X_i'y$  を、対角ブロックを

除く第  $i$  列に回帰係数行列の転置の符号を反転したものを、そして、残りの部分に、 $\mathbf{X}_j$ ,  $j \neq i$  または  $\mathbf{y}$  を  $\mathbf{X}_i$  に回帰したときの残差積和行列 (residual sum of squares and cross-product matrix)

$$\mathbf{S}_{jk.i} = \mathbf{X}'_j \mathbf{X}_k - \mathbf{X}'_j \mathbf{X}_i (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i \mathbf{X}_k = \mathbf{X}'_j (\mathbf{I} - \mathbf{X}_i (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i) \mathbf{X}_k = \mathbf{X}'_j \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i) \mathbf{X}_k \quad (132)$$

を持ったものとなっている。なお、残差行列に定義に現れる

$$\mathbf{P}(\mathbf{X}_i) = \mathbf{X}_i (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i \quad \text{and} \quad \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i) = \mathbf{I} - \mathbf{X}_i (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i = \mathbf{I} - \mathbf{P}(\mathbf{X}_i) \quad (133)$$

は、それぞれ、 $\mathbf{X}_i$  の列ベクトルで張られる空間 ( $\mathbf{X}_i$  の列空間) への射影子とその直交補空間への射影子と呼ばれるものであり、対称かつ冪等

$$\mathbf{P}(\mathbf{X}_i) = \mathbf{P}(\mathbf{X}_i)', \mathbf{P}(\mathbf{X}_i)^2 = \mathbf{P}(\mathbf{X}_i), \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i) = \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i)', \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i)^2 = \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i) \quad (134)$$

以上の議論で、拡大積和行列をその第  $i$  対角ブロックでスイープしたもの  $\text{Swp}(\mathbf{S} \mid (i))$  の最終ブロック (第  $G+1, G+1$  ブロック) には  $\mathbf{y}$  を  $\mathbf{X}_i$  に回帰したときの残差の2乗和  $\mathbf{y}' \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i) \mathbf{y}$  が入ることが分かった。すなわち

$$\text{Swp}(\mathbf{S} \mid (i))[G+1:G+1] = \mathbf{y}' \mathbf{Q}(\mathbf{X}_i) \mathbf{y} = \mathbf{y}' (\mathbf{I} - \mathbf{X}_i (\mathbf{X}'_i \mathbf{X}_i)^{-1} \mathbf{X}'_i) \mathbf{y} \quad (135)$$

である。

次に、 $\text{Swp}(\mathbf{S} \mid (i))$  をその第  $j$  対角ブロックでスイープしたものを考えると、スイープの加算性から

$$\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{S} \mid (i)) \mid (j)) = \text{Swp}(\mathbf{S} \mid (i, j)) \quad (136)$$

となるが、その最終ブロックには  $\mathbf{y}$  を  $\mathbf{X}_i$  と  $\mathbf{X}_j$  の両方、すなわち  $\{\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j\}$  に回帰したときの残差の2乗和  $\mathbf{y}' \mathbf{Q}(\{\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j\}) \mathbf{y}$  が入ることになる。

したがって、この二つの残差の2乗和を比べることにより、 $\mathbf{X}_i$  に  $\mathbf{X}_j$  を加えたときの効果を知ることが出来る。すなわち、モデル

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta}_i + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (137)$$

に新たに説明変数群  $\mathbf{X}_j$  を加えたモデル

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta}_i + \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta}_j + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (138)$$

の効果調べていることになる。

一般的には、回帰係数群を、一定の順序で順に加えていき、そのたびに残差の減少分

$$\text{Swp}(\mathbf{S} \mid (1, 2, \dots, i-1))[G+1:G+1] \quad (139)$$

$$-\text{Swp}(\text{Swp}(\mathbf{S} \mid (1, 2, \dots, i-1)) \mid (i))[G+1:G+1] \quad (140)$$

を記録していくことになるが、これはモデル

$$\mathbf{y} = \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{X}_j \boldsymbol{\beta}_j + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (141)$$

と、それに  $X_i$  を加えたモデル

$$y = \sum_{j=1}^{i-1} X_j \beta_j + X_i \beta_i + \varepsilon \quad (142)$$

を比較する平方和となっている。このようにして求める平方和の事を Type I 平方和と呼んでいる。

また、デザイン行列として zero-sum 型のものを用いて、説明変数の入れ方を考慮すると、Type II や Type III の平方和を計算することも可能である。

\*\*\*\*\*

検定仮説は

$$Q(\{X_1, X_2, \dots, X_{i-1}\})X_i \beta_i = 0 \quad (143)$$

TYPE II SS

TYPE III SS

$X_1, X_2$  が直交する時

$$y = [ X_1 \quad X_2 ] \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad (144)$$

において  $\beta_2 = 0$  を検定するのは簡単。

したがって、

$$y = [ X_1 \quad Q(X_1)X_2 ] \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} \quad (145)$$

において  $\beta_2 = 0$  を検定するのは簡単。

コクランの射影子分解定理？

\*\*\*\*\*

## References

- Beaton, A.E. (1964) The use of special matrix operators in statistical calculus. *Ed. D thesis, Harvard University*. Reprinted as Educational Testing Service Research Bulletin 64-51. Princeton, N.J.
- Dempster, A.P. (1969). *Elements of continuous multivariate analysis*. Reading, MA: Addison-Wesley.
- Goodnight, J.H. (1979) Tutorial on the SWEEP operator. *The American Statistician*, 33, 3, 149-158.
- Ralston, Anthony (1960) *Mathematical Methods for Digital Computers*. New York: John Wiley & Sons.



- Enslein, K., Ralston, A., & Wilf, H. S. (1977) *Statistical Methods for Digital Computers*. Volume III of *Mathematical Methods for Digital Computers*. New York: John Wiley & Sons.
- 前川眞一 (1997) SAS による多変量データの解析 竹内啓監修 SASで学ぶ統計的データ解析 4. 東京大学出版会
- 新村秀一 (1983) 重回帰分析における掃き出し演算子 オペレーションズ・リサーチ. 11 月号
- 高橋行夫・芳賀敏郎 (1989) SAS による実験データの解析 竹内啓監修 SASで学ぶ統計的データ解析 2. 東京大学出版会