講座

重回帰分析における掃き出し演算子

新村 秀一

1. はじめに

Gauss-Jordan の掃出し法（Gauss 法または掃き出し法と略す）は，大学理工学課程の線形代数において，逆行列解法として習われた方も多いと思います．しかし，統計計算における掃き出し演算子の重要性は，重回帰分析の最小二乗法それ自体を理解するための重要な手法であり概念でもあります．この副産物としては，パラメータの推定値，誤差平方和，行列式，各種平方和，Doolittle 行列，Cholesky 行列，一般逆行列等が得られる．また逐次変数選択法と総当り法のアルゴリズムを与えてくれる．

このように，統計上重要な手法であるにかかわらず，日本語の文献による紹介は少ない．目についたかぎりではドレイパー[文献 1]，小林[文献 2]，石川[文献 3]に紹介されている．そこで，本稿では統計解析システム SAS*（Statistical Analysis System）の開発者の 1 人 G. H. Goodnight による文献[文献 4，5]を中心にして紹介したい．

ここで扱うモデルは(1.1)で示す重回帰モデルである．

$$y = X\beta + \varepsilon \tag{1.1}$$

y：$(n\times 1)$反応ベクトル

X：$(n\times p)$配置行列．通常 1 列目は定数項に対応し 1 の値をとる

β：$(p\times 1)$未知回帰係数．通常第 1 要素は定数項パラメータ

ε：$(n\times 1)$誤差ベクトル

2. 逆行列と掃き出し法

2.1 導入

掃き出し法は，正則な n 次正方行列 A の逆行列 A^{-1} を求めるために，拡大行列 $[A \vdots E]$ に次の行演算を行なう．

［行演算］

①行をスカラー倍する．

②ある行に他の行のスカラー倍を加える．

そして，元の行列 A の場所を単位行列化することにより単位行列 E があった場所に A^{-1} が求まる．

$$[A \vdots E] \xrightarrow{\text{行演算}} [E \vdots A^{-1}] \tag{2.1}$$

この変換は，次の n 元 n 次連立方程式(2.2)

$$Ax = c = (Ec) \tag{2.2}$$

A：$(n\times n)$係数行列

x：$(n\times 1)$変数ベクトル

c：$(n\times 1)$定数項ベクトル

の解を得るために，

①′方程式を定数倍する．

②′ 1 つの方程式の定数倍したものを他の方程式に加える，という操作によって解を求める過程を x と c の係数行列 A と E についてまとめたものと同値である．

2.2 例 題

次の 2 元 2 次連立方程式(2.4)を考える．

$$\begin{aligned} 3x_1 + 1x_2 &= c_1 \\ 6x_1 + 3x_2 &= c_2 \end{aligned} \tag{2.4}$$

以下では，通常の方程式の消去法により解を求める操作を左側に，その係数行列の変化を右側に対応させて書くことにする．

①最初の方程式に 1/3 を掛ける．

$$\begin{aligned} x_1 + 1/3x_2 &= 1/3c_1 \\ 6x_1 + 3x_2 &= c_2 \end{aligned} \qquad \left(\begin{array}{cc:cc} 1 & 1/3 & 1/3 & 0 \\ 6 & 3 & 0 & 1 \end{array}\right) \tag{2.5}$$

②次に，最初の方程式の－6 倍を 2 番目に加える．

$$\begin{aligned} x_1 + 1/3x_2 &= 1/3c_1 \\ x_2 &= -2c_1 + c_2 \end{aligned} \qquad \left(\begin{array}{cc:cc} 1 & 1/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \end{array}\right) \tag{2.6}$$

③最後に，2 番目の方程式の －1/3 倍を，最初の方程式に加える．

$$\begin{aligned} x_1 &= c_1 - 1/3c_2 \\ x_2 &= -2c_1 + c_2 \end{aligned} \qquad \left(\begin{array}{cc:cc} 1 & 0 & 1 & -1/3 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \end{array}\right) \tag{2.7}$$

以上のように，方程式の代入消去による過程と行演算

しんむら しゅういち 住商コンピューターサービス㈱

＊ＳＡＳはＳＡＳ社の登録商標である．

は1対1に対応している．

一方，容易にわかるように，$\boldsymbol{c}=(1\quad 1)'$ のような具体的な値をもてば $A^{-1}\boldsymbol{c}$ で解が求められるが，(2.1)で単位行列 E の代りに直接 $E\boldsymbol{c}=\boldsymbol{c}=(1\quad 1)'$ を置くことにより $\boldsymbol{c}$ の場所に解 $\boldsymbol{x}$ が求まる．

$$[A \mid \boldsymbol{c}] \xrightarrow{\text{行演算}} [E \mid \boldsymbol{x}(=A^{-1}\boldsymbol{c})] \tag{2.9}$$

逆行列と解を同時に必要とする場合は，次の拡大行列に行演算を行なえばよい．

$$[A \mid \boldsymbol{c} \mid E] \xrightarrow{\text{行演算}} [E \mid A^{-1}\boldsymbol{c} \mid A^{-1}] \tag{2.10}$$

以上から，行演算は拡大行列の左側から行列を掛けることに等しく，それが逆行列の場合に意義がある．

$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{c} \xrightarrow{A^{-1}\text{を掛ける}} \boldsymbol{x}=A^{-1}\boldsymbol{c} \tag{2.11}$$

$$A^{-1}[A \mid \boldsymbol{c}] \longrightarrow [A^{-1}A \mid A^{-1}\boldsymbol{c}]=[E \mid \boldsymbol{x}] \tag{2.12}$$

3. 重回帰モデルへの応用

3.1 導入

重回帰モデル(1.1)の解は，$\boldsymbol{b}$ を変数とし $X'X$ と $X'\boldsymbol{y}$ を係数行列とする次の連立(正規)方程式の解 $\boldsymbol{b}$ として求められる．

$$X'X\boldsymbol{b}=X'\boldsymbol{y} \tag{3.1}$$

この時，次の拡大行列 (3.2) に行演算を実行すれば，(2.9)と同じく解 $\boldsymbol{b}$ が元の $X'\boldsymbol{y}$ の場所に求まる．

$$[X'X \mid X'\boldsymbol{y}] \xrightarrow{\text{行演算}} [E \mid \boldsymbol{b}] \tag{3.2}$$

$X'X$ を単位行列化する行演算は，(3.1)の両辺に逆行列$(X'X)^{-1}$を掛けて $\boldsymbol{b}=(X'X)^{-1}X'\boldsymbol{y}$ を求めることに等しい．

3.2 誤差平方和

$\boldsymbol{b}$ 値に加えて誤差平方和を得るためには，次の拡大行列を考えればよい．

$$\left[\begin{array}{c|c} X'X & X'\boldsymbol{y} \\ \hline \boldsymbol{y}'X & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} \end{array}\right] \tag{3.3}$$

もし，(3.3)の左側に次の行列(3.4)

$$\left[\begin{array}{c|c} (X'X)^{-1} & \mathbf{0} \\ \hline -\boldsymbol{y}'X(X'X)^{-1} & 1 \end{array}\right] \tag{3.4}$$

を掛ければ，

$$\left[\begin{array}{c|c} E & (X'X)^{-1}X'\boldsymbol{y} \\ \hline \mathbf{0} & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'X(X'X)^{-1}X'\boldsymbol{y} \end{array}\right] \tag{3.5}$$

になる．(3.3)の左側に行列(3.4) を掛けて行列(3.5) が得られたので，次の行演算が可能である．

$$\left[\begin{array}{c|c} X'X & X'\boldsymbol{y} \\ \hline \boldsymbol{y}'X & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} \end{array}\right] \xrightarrow{\text{行演算}} \left[\begin{array}{c|c} E & (X'X)^{-1}X'\boldsymbol{y} \\ \hline \mathbf{0} & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}'X(X'X)^{-1}X'\boldsymbol{y} \end{array}\right] \tag{3.6}$$

このように，$X'X$ の場所を単位行列化するという行演算を行なうことにより，パラメータ $\boldsymbol{\beta}$ の推定値 $\boldsymbol{b}=(X'X)^{-1}X'\boldsymbol{y}$ と誤差平方和 $\mathrm{SSE}=\boldsymbol{y}'(E-X(X'X)^{-1}X')\boldsymbol{y}$ が求められた．ここで$(E-X(X'X)^{-1}X')$は，X の直交補空間への射影行列である．

3.3 重回帰モデルの拡張

重回帰モデル (1.1) で，パラメータ $\boldsymbol{\beta}$ が同じで異なる k 個の反応ベクトル $\boldsymbol{y}_1,\cdots,\boldsymbol{y}_k$ を考える．この k 個の重回帰モデルをまとめて(3.7)のように表わすことにする．

$$Y=XB+E_{\varepsilon} \tag{3.7}$$

ただし，$Y=(\boldsymbol{y}_1\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_k), E=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\cdots,\boldsymbol{\varepsilon}_k)$

この時，(3.6)は次のように変更される．

$$\left[\begin{array}{c|c} X'X & X'Y \\ \hline Y'X & Y'Y \end{array}\right] \xrightarrow{\text{行演算}} \left[\begin{array}{c|c} E & (X'X)^{-1}X'Y \\ \hline \mathbf{0} & Y'Y-Y'X(X'X)^{-1}X'Y \end{array}\right] \tag{3.8}$$

この時，$(X'X)^{-1}X'Y$ の各列は k 個の重回帰モデルの推定値 $B=(\boldsymbol{b}_1,\cdots,\boldsymbol{b}_k)$ になる．一方，$Y'Y-Y'X(X'X)^{-1}X'Y$ は$(k\times k)$の誤差平方和積和行列 (SS & CP) を表わし，対角要素は各モデルの誤差平方和を表わす．

4. ADJUST(k)演算子とサブモデル

4.1 ADJUST(k)演算子

以上述べた行演算の特別なものとして，行列A の対角要素 a_{kk} で次のピボッティングを行なう ADJUST(k) 演算子を定義する．

step 1：k 行を a_{kk} で割る．

$$a_{kj}=a_{kj}/a_{kk}\ (j=1,\cdots,p)$$

step 2：$i\neq k$ の i 行から，($a_{ik}\times k$ 行の値)を減じる．

$$\begin{aligned} a_{ij}&=a_{ij}-a_{ik}(a_{kj}/a_{kk}) \\ &=a_{ij}-a_{ik}a_{kj}/a_{kk} \\ &\quad (i\neq k, j=1,\cdots,p) \end{aligned} \tag{4.1}$$

4.2 ADJUST(1)の適用

次の2変数モデル(4.2)を考える．

$$y_i=\beta_0+\beta_1x_i+\beta_2z_i+\varepsilon_i \quad (i=1,\cdots,n) \tag{4.2}$$

この重回帰モデルの(3.6)に対応する拡大行列 A は次の通りである．

$$A=\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum z_i & \sum y_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_iz_i & \sum x_iy_i \\ \sum z_i & \sum z_ix_i & \sum z_i^2 & \sum z_iy_i \\ \sum y_i & \sum y_ix_i & \sum y_iz_i & \sum y_i^2 \end{bmatrix} \tag{4.3}$$

ADJUST(1)演算子を A で実行すれば，次の(4.4)の行列 A_1 が得られる．

$$A_1=\left[\begin{array}{c|ccc} 1 & \bar{x} & \bar{z} & \bar{y} \\ \hline 0 & \sum x_i^2-n\bar{x}^2 & \sum x_iz_i-n\bar{x}\bar{z} & \sum x_iy_i-n\bar{x}\bar{y} \\ 0 & \sum x_iz_i-n\bar{x}\bar{z} & \sum z_i^2-n\bar{z}^2 & \sum z_iy_i-n\bar{z}\bar{y} \\ 0 & \sum x_iy_i-n\bar{x}\bar{y} & \sum z_iy_i-n\bar{z}\bar{y} & \sum y_i^2-n\bar{y}^2 \end{array}\right] \tag{4.4}$$

行列 A_1 の右上(1×3)行列は X, 次の各サブモデルの推定値を表わす.

$$
\begin{aligned}
x&=\beta_0'+\varepsilon'\\
z&=\beta_0''+\varepsilon''\\
y&=\beta_0'''+\varepsilon'''
\end{aligned}
\tag{4.5}
$$

この時, $\beta_0',\beta_0'',\beta_0'''$ の推定値は $\bar{x},\bar{z},\bar{y}$ である. A_1 の右下(3×3)行列は, 平均値による修正済み平方和積和行列である. この対角要素は,(4.5)の各サブモデルの修正済み誤差平方和になる. また $(\sum x_i z_i - n\bar{x}\bar{z})/(\sqrt{(\sum x_i^2 - n\bar{x}^2)}\sqrt{\sum z_i^2 - n\bar{z}^2})$ は x と z の相関係数を表わすことから, x,y,z の相関行列が簡単に求まる.

4.3 サブモデルの拡大行列

配置行列 X を2つの部分行列 X_1 と X_2 に分割した場合, $X'X$ は(4.6)で表わされる.

$$
X'X=\begin{pmatrix} X_1' \\ X_2' \end{pmatrix}(X_1\,X_2)=\begin{pmatrix} X_1'X_1 & X_1'X_2 \\ X_2'X_1 & X_2'X_2 \end{pmatrix}
\tag{4.6}
$$

これを(3.3)に代入して(4.7)が得られる.

$$
\left[\begin{array}{cc:c} X_1'X_1 & X_1'X_2 & X_1'\boldsymbol{y} \\ X_2'X_1 & X_2'X_2 & X_2'\boldsymbol{y} \\ \hdashline \boldsymbol{y}'X_1 & \boldsymbol{y}'X_2 & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} \end{array}\right]=\left[\begin{array}{c:cc} X_1'X_1 & X_1'X_2 & X_1'\boldsymbol{y} \\ \hdashline X_2'X_1 & X_2'X_2 & X_2'\boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{y}'X_1 & \boldsymbol{y}'X_2 & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} \end{array}\right]
\tag{4.7}
$$

この(4.7)の右側のように $X'X$ の代りに $X_1'X_1$ を考えれば, 元の X に対応するパラメータ $\boldsymbol{\beta}=(\boldsymbol{\beta}_1\boldsymbol{\beta}_2)$ の部分パラメータ $\boldsymbol{\beta}_1$ を説明変数とし, $Y=(X_2\boldsymbol{y})$ を反応行列とする(3.7)と同じ次の重回帰モデルを考えたことになる.

$$
Y=X_1B_1+E_{\varepsilon}
$$

ただし, $B_1=(\boldsymbol{\beta}_1^{X_2}\boldsymbol{\beta}_1)$

$\boldsymbol{\beta}_1^{X_2}$ は X_2 を反応変量とした場合のパラメータ. このことと3.3節から, ADJUST 演算子の実行は, 拡大行列の右上部に各サブモデルのパラメータの推定値, そして右下部に誤差平方和積和行列を生じさせる.

4.4 ADJUST(2)と(3)の適用

行列 A_1 に ADJUST(2) を適用して行列 A_2 を得る.

$$
A_2=\left[\begin{array}{cc:cc} 1 & 0 & b_0' & b_0'' \\ 0 & 1 & b_1' & b_1'' \\ \hdashline 0 & 0 & \multicolumn{2}{c}{\text{SS\&CP}} \\ 0 & 0 & & \end{array}\right]
\tag{4.9}
$$

A_2 の右上(2×2)行列は, 次のサブモデルのパラメータの推定値になる.

$$
\begin{aligned}
z&=\beta_0'+\beta_1'x+\varepsilon'\\
y&=\beta_0''+\beta_1''x+\varepsilon''
\end{aligned}
\tag{4.10}
$$

右下(2×2)行列は, これら2つのサブモデルに対する誤差平方和積和行列になり, その対角要素はサブモデルの誤差平方和になる.

最後に ADJUST(3)演算子を行列 A_2 に操作して行列 A_3 を得る.

$$
A_3=\left[\begin{array}{ccc:c} 1 & 0 & 0 & b_0 \\ 0 & 1 & 0 & b_1 \\ 0 & 0 & 1 & b_2 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 & \text{SS\&CP} \end{array}\right]
\tag{4.11}
$$

行列 A_3 は,(4.2)の2変量モデルの推定値と誤差平方和を与える.

さて, 行列 A の (i,j) 要素を a_{ij} で表わすことにすれば, $\boldsymbol{y}'\boldsymbol{y}$ が格納されている a_{44} 要素は, ADJUST(k)が実施されると(4.1)より $(a_{k4})^2/a_{kk}$ だけ減少する. この誤差平方和の減少分が, β_k のタイプI平方和とよばれ, 逐次 F 検定 $(H_0: \beta_j \fallingdotseq 0(\text{for } j=1,\cdots,k-1)\beta_k=0)$ に用いられる平方和である.

一方, 行列 A が ADJUST(1) から順に ADJUST $(k-1)$ まで行なわれた時, 要素 a_{kk} は次のモデルの誤差平方和になる.

$$
x_k=\beta_0+\beta_1x_1+\cdots+\beta_{k-1}x_{k-1}+\varepsilon
\tag{4.12}
$$

このモデルの R^2 値は, $\mathrm{CSS_K}$ を x_k の修正済み平方和とすれば(4.13)で定義される.

$$
R^2{}_k=(\mathrm{CSS}_k-a_{kk})/\mathrm{CSS}_k
\tag{4.13}
$$

この時, $R_k{}^2>.999$ のような大きな値をとれば, x_k は先行する $x_1,\cdots,x_{k-1}$ の線形結合とみなせるので, $R^2{}_k$ 値は多重共線性のチェックとして使える.

5. READJUST(k)演算子

次のような拡大行列(5.1)の部分行列 $X'X$ の対角要素を ADJUST で操作することにより, 回帰係数, 誤差平方和(SSE), そして逆行列が同時に計算される.

$$
\begin{bmatrix} X'X & X'\boldsymbol{y} & E \\ \boldsymbol{y}'X & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \xrightarrow[X'X]{\text{ADJUST}} \begin{bmatrix} E & \boldsymbol{b} & (X'X)^{-1} \\ \mathbf{0} & \text{SSE} & -\boldsymbol{b}' \end{bmatrix}
\tag{5.1}
$$

これは, 次の行列演算に等しい.

$$
\left[\begin{array}{c:c} (X'X)^{-1} & \mathbf{0} \\ \hdashline -\boldsymbol{y}'X(X'X)^{-1} & E \end{array}\right]\left[\begin{array}{c:c:c} X'X & X'\boldsymbol{y} & E \\ \hdashline \boldsymbol{y}'X & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} & \mathbf{0} \end{array}\right]=\begin{bmatrix} E & \boldsymbol{b} & (X'X)^{-1} \\ \mathbf{0} & \text{SSE} & -\boldsymbol{b}' \end{bmatrix}
\tag{5.2}
$$

この ADJUST 演算子を表わす行列の逆行列は(5.3)で与えられる.

$$
\begin{bmatrix} X'X & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{y}'X & E \end{bmatrix}
\tag{5.3}
$$

この行列を ADJUST 後の拡大行列の左側から掛けると, 元の拡大行列が復元される.

$$
\begin{bmatrix} E & \boldsymbol{b} & (X'X)^{-1} \\ \mathbf{0} & \text{SSE} & -\boldsymbol{b}' \end{bmatrix} \xrightarrow[(X'X)^{-1}]{\text{READJUST}} \begin{bmatrix} X'X & X'\boldsymbol{y} & E \\ \boldsymbol{y}'X & \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} & \mathbf{0} \end{bmatrix}
\tag{5.4}
$$

そこで, この逆 ADJUST 演算子(READJUST)は, $(X'X)^{-1}$ を単位行列化することがわかる.

6. 逐次変数選択法

ADJUST 演算子はモデルに変数を取り込み，READJUST 演算子はモデルから変数を掃き出す．これを用いて逐次変数選択法と総当り法が行なえる．これを次の 2 変数モデル(6.1)を用いて説明する．

$$\begin{array}{c}y\\ \begin{pmatrix}2\\2\\1\\1\\1\\0\\0\end{pmatrix}\end{array} = \begin{array}{c}x_0\ \ x_1\ \ x_2\\ \begin{pmatrix}1&4&0\\1&3&0\\1&2&1\\1&3&2\\1&1&1\\1&1&1\\1&0&2\end{pmatrix}\end{array} \begin{pmatrix}\beta_0\\\beta_1\\\beta_2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\varepsilon_1\\\varepsilon_2\\\varepsilon_3\\\varepsilon_4\\\varepsilon_5\\\varepsilon_6\\\varepsilon_7\end{pmatrix} \tag{6.1}$$

ステップ0 拡大行列

$$\begin{array}{c}\begin{array}{ccccccc}x_0&x_1&x_2&\beta&x_0&x_1&x_2\end{array}\\ \begin{bmatrix}7&14&7&7&1&0&0\\14&40&10&20&0&1&0\\7&10&11&4&0&0&1\\7&20&4&11&0&0&0\end{bmatrix}\end{array} \tag{6.2}$$

ステップ1 x_0取り込み

$$\begin{bmatrix}1&2&1&1&\frac{1}{7}&0&0\\0&12&-4&6&-2&1&0\\0&-4&4&-3&-1&0&1\\0&6&-3&4&-1&0&0\end{bmatrix} \tag{6.3}$$

ステップ2 x_1取り込み

$$\begin{pmatrix}1&0&\frac{5}{3}&0&\frac{10}{21}&-\frac{1}{6}&0\\0&1&-\frac{1}{3}&\frac{1}{2}&-\frac{1}{6}&\frac{1}{12}&0\\0&0&\frac{8}{3}&-1&-\frac{5}{3}&\frac{1}{3}&1\\0&0&-1&1&0&-\frac{1}{2}&0\end{pmatrix} \tag{6.4}$$

ステップ3 X_2取り込み

$$\begin{pmatrix}1&0&0&\frac{5}{8}&\frac{85}{56}&-\frac{3}{8}&-\frac{5}{8}\\0&1&0&\frac{3}{8}&-\frac{3}{8}&\frac{1}{8}&\frac{1}{8}\\0&0&1&-\frac{3}{8}&-\frac{5}{8}&\frac{1}{8}&\frac{3}{8}\\0&0&0&\frac{5}{8}&-\frac{5}{8}&-\frac{3}{8}&\frac{3}{8}\end{pmatrix} \tag{6.5}$$

ステップ4 X_1掃き出し

$$\begin{pmatrix}1&3&0&\frac{14}{8}&\frac{11}{28}&0&-\frac{1}{4}\\0&8&0&3&-3&1&1\\0&-1&1&-\frac{3}{4}&-\frac{1}{4}&0&\frac{1}{4}\\0&3&0&\frac{7}{4}&-\frac{7}{4}&0&\frac{3}{4}\end{pmatrix} \tag{6.6}$$

ステップ5 X_2掃き出し

$$\begin{bmatrix}1&2&1&1&\frac{1}{7}&0&0\\0&12&-4&6&-2&1&0\\0&-4&4&-3&-1&0&1\\0&6&-3&4&-1&0&0\end{bmatrix} \tag{6.7}$$

ステップ6 X_0掃き出し

$$\begin{bmatrix}7&14&7&7&1&0&0\\14&40&10&20&0&1&0\\7&10&11&4&0&0&1\\7&20&4&11&0&0&0\end{bmatrix} \tag{6.8}$$

以上のステップをまとめると次のようになる．

step	モデルと	誤差平方和	部分モデルと	誤差平方和
0	$y=0$	11	$x_2=0$ or $x_1=0$	11or40
1	$y=1$	4	$x_2=1$ or $x_1=2$	4or 12
2	$y=0+\frac{1}{2}x_1$	1	$x_2=\frac{5}{3}-\frac{1}{3}x_1$	$\frac{8}{3}$
3	$y=\frac{5}{8}+\frac{3}{8}x_1-\frac{3}{8}x_2$	$\frac{5}{8}$		
4	$y=\frac{14}{8}-\frac{3}{4}x_2$	$\frac{7}{4}$	$x_1=3-x_2$	3
5	$y=1$	4	$x_2=1$ or $x_1=2$	4or 12
6	$y=0$	11		

フルモデル(ステップ3)から1変数 x_i を掃き出すことによって生じる誤差平方和の増分を，変数 x_i のタイプII平方和と呼ぶ．この値は，c_{ii} を $(X'X)^{-1}$ の i 番目の対角要素とした場合，$(\beta_i)^2/c_{ii}$ で与えられる．ステップ3から，x_1 のタイプII平方和は $(1/4)^2/(1/4)=1/4$，x_2 のタイプII平方和は $(2/3)^2/(2/3)=2/3$ であることがわかる．このタイプII平方和を用いて $H_0:\beta_i=0, \beta_j\neq 0\,(j=1,\cdots,i-1,i+1,\cdots,p)$ という仮説検定が行なえる．

7. SWEEP(k)演算子

SWEEP 演算子は，ADJUST 演算子(7.1)で得られる回帰係数・誤差平方和・逆行列を，配列 $[E\ \mathbf{0}]'$ 相当分を削除して行なう(7.2)．

$$\left[\begin{array}{c:c:c}X'X & X'y & E\\ \hdashline y'X & y'y & \mathbf{0}\end{array}\right] \xrightarrow[\text{for } X'X]{\text{ADJUST}} \left[\begin{array}{c:c:c}E & b & (X'X)^{-1}\\ \hdashline \mathbf{0} & \text{SSE} & -b'\end{array}\right] \tag{7.1}$$

$$\left[\begin{array}{c:c}X'X & X'y\\ \hdashline y'X & y'y\end{array}\right] \xrightarrow[\text{for } X'X]{\text{SWEEP}} \left[\begin{array}{c:c}(X'X)^{-1} & b\\ \hdashline -b' & \text{SSE}\end{array}\right] \tag{7.2}$$

SWEEP 演算子は Ralston により提案され，Beaton により完成された．このアルゴリズムは，(6.2)から(6.8)までを検討すれば容易にわかる．特定の変数がモデル中にあれば，$X'X$の対応する列の対角要素が1に残りは零になる．そしてEの対応する列のみが変化を受ける．この変化を，$X'X$ の対応する列に実現すればSWEEP演算子が作られる．

[SWEEP 演算子の定義]

対称正定値行列 $A=(a_{ij})$ に対して SWEEP(k) 演算子は次のような変換を行なう．

step 1 : $d=a_{kk}$ と置く．

step 2 : k 行を d で割る．

step 3：k 以外の i 行について $b=a_{ik}$ と置く．i 行から($b*k$ 行)を引き，$a_{ik}=-b/d$ と置く．

step 4：$a_{kk}=1/d$ と置く．

SWEEP 演算子は ADJUST 演算子の修正法にすぎないので，READJUST 演算子の修正法である RESWEEP 演算子も同様に定義できる．

次に，(6.2)から(6.3)に対応した SWEEP(1) 演算子の操作例をとりあげる．

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} x_0 & x_1 & x_2 & \beta \end{array} \\ \begin{array}{c}\text{ステップ0}\\ \text{拡大行列}\\ (6.2)\end{array} & \begin{bmatrix} 7 & 14 & 7 & 7 \\ 14 & 40 & 10 & 20 \\ 7 & 10 & 11 & 4 \\ 7 & 20 & 4 & 11 \end{bmatrix} \end{array} \tag{7.3}$$

$$\text{ステップ1・2} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 1 \\ 14 & 40 & 10 & 20 \\ 7 & 10 & 11 & 4 \\ 7 & 20 & 4 & 11 \end{bmatrix} \tag{7.4}$$

$$\text{ステップ3} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 1 \\ -2 & 12 & -4 & 6 \\ -1 & -4 & 4 & -3 \\ -1 & 6 & -3 & 4 \end{bmatrix} \tag{7.5}$$

$$\begin{array}{c}\text{ステップ4}\\ (6.3)\text{完了}\end{array} \begin{pmatrix} \frac{1}{7} & 2 & 1 & 1 \\ -2 & 12 & -4 & 6 \\ -1 & -4 & 4 & -3 \\ -1 & 6 & -3 & 4 \end{pmatrix} \tag{7.6}$$

以上から，ADJUST 演算子から得られる回帰係数・誤差平方和・逆行列・タイプⅠとⅡ平方和と同じものが配列と計算量のより少ない SWEEP 演算子で求まる．サブモデルに対しても同じことが言え，(4.7)の拡大行列の $X_1'X_1$ に SWEEP 演算子を適用すると，射影行列 $M_1=E-X_1(X_1'X_1)^{-1}X_1'$ を用いて(7.7)になる．

$$\left[\begin{array}{c:c:c} (X_1'X_1)^{-1} & (X_1'X_1)^{-1}X_1'X_2 & (X_1'X_1)^{-1}X_1'\boldsymbol{y} \\ -X_2'X_1(X_1'X_1)^{-1} & X_2'M_1X_2 & X_2'M_1\boldsymbol{y} \\ -\boldsymbol{y}'X_1(X_1'X_1)^{-1} & \boldsymbol{y}'M_1X_2 & \boldsymbol{y}'M_1\boldsymbol{y} \end{array}\right] \tag{7.7}$$

8. おわりに

本稿では，Gauss-Jordan の掃き出し法を発展した ADJUST 演算子と SWEEP 演算子を，正規方程式と関連づけられた拡大行列に作用することにより種々の統計量が得られることを示した．一方，付録で述べた Doolittle 法と Gauss-Jordan 法の数値計算上の評価は伊理先生の［文献6］が参考になるので紹介しておく．

余談になるが，本講座のもとになった文献［5］を調べれば，さらに一般化逆行列への拡張を知ることができる．紙幅の都合で割愛する．本年1月ノースカロライナにある SAS 社に Goodnight 社長を訪問した．薄暗くした部屋でターミナルを前に哲人然として座る同氏に，日本での種々の問題点を提起したがまったく興味を示さなかった．話題を変えて「掃き出し法」を日本で普及したい旨述べたところ，キャビネットから同文献を5部もとりだし机の上になげだしてくれた．変人としてなる同氏の学者としての喜びの一表現であったと推察する．

［付録］ Doolittle 法と LU 分解

Doolittle 法は，前進解と後退解の2段階よりなる．前進解は対称正定値行列Aに行演算を行ない上三角行列Bを作成する．

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{行演算}} B=\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & 0 & b_{33} \end{bmatrix}$$

ここで，$b_{11}=a_{11}, b_{12}=a_{12}, b_{13}=a_{13}$

$$b_{22}=a_{22}-a_{12}^2/a_{11}$$

$$b_{23}=a_{23}-a_{12}a_{13}/a_{11}$$

$$b_{33}=(a_{11}a_{22}a_{33}-a_{12}^2a_{33}-a_{22}a_{13}^2-a_{11}a_{23}^2+2a_{12}a_{13}a_{23})/(a_{11}a_{22}-a_{12}^2)$$

B の各行をその対角要素で割ったものを C とすれば $A=C'B$ となる．

$$C'B=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ b_{12}/b_{11} & 1 & 0 \\ b_{13}/b_{11} & b_{23}/b_{22} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ 0 & b_{22} & b_{23} \\ 0 & 0 & b_{33} \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}=A$$

この時，$|A|=|C'||B|=\prod_{i=1}^{3}b_{ii}$ と簡単に行列式の値が求まる．一方，B の各行を対角要素の平方根で割った行列を U とすれば，U は行列 A のコレスキー分解になる．

$$A=U'U$$

参考文献

1) N. R. Draper & H. Smith (中村慶一訳)：応用回帰分析，森北出版，1968

2) 小林竜一：数量化理論入門，日科技連，1981

3) 石川栄助：拡大行列での掃き出し法，数理科学，1982年3月号(No. 225)．46-49

4) J. H. Goodnight：Computational Methods in General Linear Models. ASA 1976, Proceedings of the Statistical Computing Section, ASA, Washington, D. C. (1976)

5) J. H. Goodnight：A Tutorial on the SWEEP Operator, The American Statistician, 33, 149/158(1981)

6) 伊理正夫：数値計算の常識5，bit, 14, 9(1981)