一般逆行列の初等理論

磯　野　　修

この論文の目的は統計に応用される一般逆行列をできるだけ初等的に解説することにある．現在までの一般逆行列の理論と統計的応用についての簡明な展望は Mitra [3] にあり，統計以外の各方面への応用は Ben-Israel & Greville [1] に述べられている．本論はこれらの著述への手引きの意味をもつので，使用する記法はなるべく上記の二者に近いものとした．

§1 ではベクトル空間についての諸概念を復習し，§2 および §3 で一般逆行列について述べ，§4 で統計的応用を示すこととする．

§1　射影行列

n 個の実数 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ を縦に並べた $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ を n 次元列ベクトル，横に並べた $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ を n 次元行ベクトルとよぶ．これらはいずれも n 次元ベクトルで，縦に並べるか横に並べるかはベクトルを書きあらわす場合の便宜による．本論では，とくに断り書きのない場合にはベクトルは列ベクトルとして書きあらわすものとする．ベクトルの転置を右肩に ′ をつけて示す．

n 次元ベクトル全体の集合を記号 V_n で示す．すべての成分が0のベ

クトルをゼロベクトルとよび，記号 $\mathbf{0}_n$ または $\mathbf{0}$ で示す．またすべての成分が1のベクトルを $\mathbf{1}$ ベクトルとよび，記号 $\mathbf{1}_n$ または $\mathbf{1}$ で示す．

$\mathcal{V}_n$ に属する m 個のベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_m$ が与えられたとき，$c_1, c_2, \cdots, c_m$ を任意の実数として $c_1\boldsymbol{a}_1+c_2\boldsymbol{a}_2+\cdots+c_m\boldsymbol{a}_m$ の形にあらわすことのできるベクトル全体の集合は，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_m$ の張る部分ベクトル空間とよばれる．

$\mathcal{V}_n$ の基底の一つを $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n)$ とする．$0 \leqq r \leqq n$ をみたす整数 r を定めて，$\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_r$ の張る部分ベクトル空間を $\mathcal{V}_{(1)}$，$\boldsymbol{e}_{r+1}, \boldsymbol{e}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{e}_n$ の張る部分ベクトル空間を $\mathcal{V}_{(2)}$ と書けば，$\mathcal{V}_{(1)}, \mathcal{V}_{(2)}$ はそれぞれ r 次元および $n-r$ 次元のベクトル空間になる．ただし $r=0$ または n の場合に生ずる0次元ベクトル空間とは，ゼロベクトルだけから成るベクトル空間であると定義する．

上記の $\mathcal{V}_{(1)}, \mathcal{V}_{(2)}$ を使うと，任意の $\boldsymbol{a}_1 \in \mathcal{V}_{(1)}, \boldsymbol{a}_2 \in \mathcal{V}_{(2)}$ に対して $\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2 \in \mathcal{V}_n$ であり，かつ任意の $\boldsymbol{a} \in \mathcal{V}_n$ が与えられたとき，$\boldsymbol{a}=\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2$ ただし $\boldsymbol{a}_i \in \mathcal{V}_{(i)}$ $(i=1,2)$ と分解されて，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ は一意的に定まる．このとき $\mathcal{V}_n$ は $\mathcal{V}_{(1)}$ と $\mathcal{V}_{(2)}$ の直和であるといい，$\mathcal{V}_n=\mathcal{V}_{(1)} \oplus \mathcal{V}_{(2)}$ と書く．さらに $\boldsymbol{a}_1$ を $\mathcal{V}_{(2)}$ に沿うての $\mathcal{V}_{(1)}$ 上への $\boldsymbol{a}$ の射影，$\boldsymbol{a}_2$ を $\mathcal{V}_{(1)}$ に沿うての $\mathcal{V}_{(2)}$ 上への $\boldsymbol{a}$ の射影という．

二つのベクトル $\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{y}=\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$ について $\boldsymbol{x}'\boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{n} x_i y_i$ を $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{y}$ の内積とよぶ．$\sqrt{\sum_{i=1}^{n} x_i{}^2}=\|\boldsymbol{x}\|$ は n 次元ユークリッド空間におけるベクトル $\boldsymbol{x}$ の長さを示す．$\boldsymbol{x}'\boldsymbol{y}=0$ のとき，二つのベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ は直交するといい，記号 $\boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{y}$ で示す．

上記の $\mathcal{V}_{(1)}, \mathcal{V}_{(2)}$ について，任意の $\boldsymbol{a}_1 \in \mathcal{V}_{(1)}$ と任意の $\boldsymbol{a}_2 \in \mathcal{V}_{(2)}$ に対して $\boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_2$ のとき，$\mathcal{V}_{(1)}$ と $\mathcal{V}_{(2)}$ とは直交するといい，記号 $\mathcal{V}_{(1)} \perp \mathcal{V}_{(2)}$

で示す．このとき $\mathcal{V}_{(1)}$ を，$\mathcal{V}_n$ についての $\mathcal{V}_{(2)}$ の直交補空間とよび，記号 $\mathcal{V}_{(2)}{}^{\perp}$ であらわす．対称性から $\mathcal{V}_{(2)}=\mathcal{V}_{(1)}{}^{\perp}$ である．

$\mathcal{V}_n=\mathcal{V}_{(1)}\oplus\mathcal{V}_{(2)}$，$\mathcal{V}_{(1)}\perp\mathcal{V}_{(2)}$ のとき，$\mathcal{V}_{(2)}$ に沿うての $\mathcal{V}_{(1)}$ 上への $\boldsymbol{a}\in\mathcal{V}_n$ の射影を，$\mathcal{V}_{(1)}$ 上への正射影という．同じように $\mathcal{V}_{(2)}$ 上への正射影が定義される．

定義 1·1 $m\times n$ 型の実数行列全体の集合を $\mathcal{R}^{m\times n}$ と記す．$\boldsymbol{A}\in\mathcal{R}^{m\times n}$ のとき，$\boldsymbol{A}$ を転置した $n\times m$ 型行列を $\boldsymbol{A}'$ で示す．

行列 $\boldsymbol{A}$ の階数を $\operatorname{rank}\boldsymbol{A}$ と書き，とくに $\boldsymbol{A}$ が正方行列の場合に対角元の和を $\operatorname{trace}\boldsymbol{A}$ で示す．

なお行列について記号 $\boldsymbol{O}$ はすべての成分が 0 の行列を示すものとする．n 次の単位行列を $\boldsymbol{I}_n$ または $\boldsymbol{I}$ と書く．さらにベクトルおよび行列について，必要な場合にはそのサイズを $\underset{m\times n}{\boldsymbol{A}}$ のように行列記号の下または右下に記すものとする．

定義 1·2 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{R}^{m\times n}$ を列ベクトルによって $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots\boldsymbol{a}_n)$ と書くとき，$\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n$ の張る部分ベクトル空間を $\boldsymbol{A}$ の列ベクトル空間とよび，記号 $\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ で示す．

同じく $\boldsymbol{A}$ を行ベクトルによって $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{a}_2\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_m\end{pmatrix}$ と書くとき，$\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_m$ の張る部分ベクトル空間を $\boldsymbol{A}$ の行ベクトル空間とよび，記号 $\mathcal{L}(\boldsymbol{A})$ で示す．

命題 1·1 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{R}^{m\times n}$，$\operatorname{rank}\boldsymbol{A}=r$ とする．

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{A}'\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0},\ \boldsymbol{x}\in\mathcal{V}_m\}$$

とおけば，$\mathcal{M}(\boldsymbol{A}),\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ の次元はそれぞれ $r,n-r$ であって，

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{A})\perp\mathcal{N}(\boldsymbol{A}'),\qquad \mathcal{V}_m=\mathcal{M}(\boldsymbol{A})\oplus\mathcal{N}(\boldsymbol{A}').$$

証明　$\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ の次元が r となることは明か．定義から

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{A})^{\perp}=\{\boldsymbol{y}:(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})'\boldsymbol{y}=0,\ \boldsymbol{x}\in\mathcal{V}_n,\ \boldsymbol{y}\in\mathcal{V}_m\}$$

であるが，$(\boldsymbol{Ax})'\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}'\boldsymbol{y}=0$ における $\boldsymbol{x}\in\mathcal{V}_n$ は任意であるから，この式は $\boldsymbol{A}'\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ と同義. これをみたす $\boldsymbol{y}\in\mathcal{V}_m$ の集合は $\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ にほかならない.

したがって $\mathcal{M}(\boldsymbol{A})^{\perp}=\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ となり，これから $\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ の次元が $n-r$ であることと，$\mathcal{V}_m=\mathcal{M}(\boldsymbol{A})\oplus\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ が出る.　(終)

命題 1·1 の系 1　$\boldsymbol{A}\in\mathcal{R}^{m\times n}$ のとき，$\mathcal{M}(\boldsymbol{A})=\mathcal{M}(\boldsymbol{AA}')$. したがって rank $\boldsymbol{A}$=rank $\boldsymbol{AA}'$.

証明　$\boldsymbol{AA}'\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ ならば $\boldsymbol{y}'\boldsymbol{AA}'\boldsymbol{y}=0$. したがって $\boldsymbol{A}'\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}$ となって，$\mathcal{N}(\boldsymbol{AA}')\subset\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$. 上の命題を使って

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{AA}')=\mathcal{N}(\boldsymbol{AA}')^{\perp}\supset\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')^{\perp}=\mathcal{M}(\boldsymbol{A}).$$

他方 $\mathcal{M}(\boldsymbol{AA}')\subset\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ は列ベクトル空間の定義から明らかであるから，二つの包含関係をあわせて，$\mathcal{M}(\boldsymbol{AA}')=\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$.

したがって $\boldsymbol{AA}'$ と $\boldsymbol{A}$ の階数は等しい.　(終)

命題 1·1 の系 2　n 次正方行列 $\boldsymbol{A}$ が対称ならば，$\mathcal{M}(\boldsymbol{A})\perp\mathcal{N}(\boldsymbol{A})$, $\mathcal{V}_n=\mathcal{M}(\boldsymbol{A})\oplus\mathcal{N}(\boldsymbol{A})$.

例 1·1　$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{1}_m$ のとき，$\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ を m 次元ユークリッド空間上で示せば，原点を通り，かつ座標軸の正方向を示す半直線のすべてと等角に交わる直線 l の張る 1 次元ベクトル空間である. $\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ は直線 l と直交する $m-1$ 次元の超平面である.

例 1·2　$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{1},\boldsymbol{a})\in\mathcal{R}^{m\times 2}$, rank $\boldsymbol{A}=2$ ならば，$\boldsymbol{1}$ と $\boldsymbol{a}$ とは 1 次独立で，$\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ は $\boldsymbol{1}$ と $\boldsymbol{a}$ の張る 2 次元の超平面である. $\boldsymbol{a}=\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}$, $\bar{a}=\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}a_i$ と書けば，$\boldsymbol{1}$ と $\boldsymbol{a}-\bar{a}\boldsymbol{1}$ とは $\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ の直交基底となる. $\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ は上記の 2 次元の超平面の直交補空間で，とくに $m=3$ ならば $\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ は 3 次元空間内の平面，$\mathcal{N}(\boldsymbol{A}')$ はその平面の法線ベクトルの張る 1 次元ベクトル空間である.

回帰分析では対称なベキ等行列が登場する. それはこの種の行列が正射影行列としての役目を果すからである. はじめベキ等行列について復習し，

それが対称のとき正射影行列となることを述べる.

定義 1・3 正方行列 $A\in\mathcal{R}^{n\times n}$ が条件 $AA=A$ をみたすとき，これをベキ等行列という.

命題 1・2 ベキ等行列の固有値は0または1である.

証明 ベキ等行列 A の固有値を λ, これに対応する固有ベクトルを x とする. AA を A^2 と書くとき，$Ax=\lambda x$ の両辺に対して左から A をかけて，$A^2x=\lambda Ax=\lambda^2 x$. 他方 $A^2x=Ax=\lambda x$ であるから，$\lambda^2 x=\lambda x$ すなわち $\lambda(\lambda-1)x=0$. ここで x はゼロベクトルではないから，$\lambda=0$ または 1. （終）

A が n 次のベキ等行列のとき，任意の $a\in\mathcal{V}_n$ に対して明かに

$$a=Aa+(I-A)a.$$

ここで $a_1=Aa\in\mathcal{M}(A)$ は明か. $a_2=(I-A)a$ とおけばベキ等性から $Aa_2=A(I-A)a=0$. したがって $a_2\in\mathcal{N}(A)$ となる. ここで a_1, a_2 は一意的に定まる. さらに任意の $a_1\in\mathcal{M}(A)$, $a_2\in\mathcal{N}(A)$ に対して $a_1+a_2\in\mathcal{V}_n$ は明かであるから，$\mathcal{V}_n=\mathcal{M}(A)\oplus\mathcal{N}(A)$ となる.

この事実をつぎのように述べる.

命題 1・3 A がベキ等行列のとき，A は $\mathcal{N}(A)$ に沿うての $\mathcal{M}(A)$ 上への射影行列である. また $I-A$ は $\mathcal{M}(A)$ に沿うての $\mathcal{N}(A)$ 上への射影行列である.

この命題の逆は，

命題 1・4 $\mathcal{V}_n=\mathcal{V}_{(1)}\oplus\mathcal{V}_{(2)}$ のとき，$\mathcal{V}_{(1)}, \mathcal{V}_{(2)}$ の次元をそれぞれ r, $n-r$ とする. $\mathcal{V}_{(1)}, \mathcal{V}_{(2)}$ の基底を列ベクトルの形で書きあらわしたものを，それぞれ $(e_1, e_2, \cdots, e_r)$, $(e_{r+1}, e_{r+2}, \cdots, e_n)$ とし，

$$\left.\begin{aligned} E_{(1)}&=(e_1, e_2, \cdots, e_r)\in\mathcal{R}^{n\times r}\\ E_{(2)}&=(e_{r+1}, e_{r+2}, \cdots, e_n)\in\mathcal{R}^{n\times(n-r)}\end{aligned}\right\}\tag{1.1}$$

とおく.

このとき

（i）行列

$$A=(E_{(1)},\ \underset{n\times(n-r)}{O})(E_{(1)},E_{(2)})^{-1} \tag{1.2}$$

はベキ等であって，$\mathcal{V}_{(2)}$ に沿うての $\mathcal{V}_{(1)}$ 上への射影行列である．

（ii）上記の行列 A は，$\mathcal{V}_{(1)},\mathcal{V}_{(2)}$ における基底のとり方に依存せずに一意的に定まる．

ただし $r=0$ のときは $A=\underset{n\times n}{O}$，$r=n$ のときは $A=I_n$ とおくものとする．

証明　$r=0$ または n の場合は明かであるから，$1\leqq r\leqq n-1$ の場合を考える．

（i）任意の $a\in\mathcal{V}_n$ を定め，

$$a=a_1e_1+a_2e_2+\cdots+a_ne_n$$

とする．$\mathcal{V}_{(2)}$ に沿うての $\mathcal{V}_{(1)}$ 上への射影行列 A の存在を仮定すれば，

$$Aa=a_1e_1+\cdots+a_re_r$$

であるから

$$\left.\begin{aligned} Ae_i&=e_i \qquad (i=1,2,\cdots,r)\\ Ae_j&=0 \qquad (j=r+1,\cdots,n)\end{aligned}\right\} \tag{1.3}$$

すなわち，

$$A(E_{(1)},E_{(2)})=(E_{(1)},\ \underset{n\times(n-r)}{O}) \tag{1.4}$$

ここで $(E_{(1)},E_{(2)})$ は正則行列であるから，(1.4) から (1.2) が導かれ，存在を仮定した A は (1.2) の形で確かに存在する．

このとき (1.3) から出る $AE_{(1)}=E_{(1)}$ を使って

$$\begin{aligned} A^2&=A(E_{(1)},O)(E_{(1)},E_{(2)})^{-1}\\ &=(E_{(1)},O)(E_{(1)},E_{(2)})^{-1}=A\end{aligned}$$

となり，A のベキ等性が示される．

（ii） つぎに $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_r)$，$(\boldsymbol{e}_{r+1}, \boldsymbol{e}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{e}_n)$ とは異なる $\mathcal{V}_{(1)}, \mathcal{V}_{(2)}$ の基底をそれぞれ $(\boldsymbol{f}_1, \boldsymbol{f}_2, \cdots, \boldsymbol{f}_r)$，$(\boldsymbol{f}_{r+1}, \boldsymbol{f}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{f}_n)$ とし，(1.1) にならって

$$\boldsymbol{F}_{(1)} = (\boldsymbol{f}_1, \boldsymbol{f}_2, \cdots, \boldsymbol{f}_r) \in R^{n\times r}$$
$$\boldsymbol{F}_{(2)} = (\boldsymbol{f}_{r+1}, \boldsymbol{f}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{f}_n) \in R^{n\times(n-r)}$$

とおく．

$$(\boldsymbol{F}_{(1)}, \boldsymbol{O})(\boldsymbol{F}_{(1)}, \boldsymbol{F}_{(2)})^{-1} \tag{1.5}$$

も $\mathcal{V}_{(2)}$ に沿うての $\mathcal{V}_{(1)}$ 上への射影行列となるが，これが上記の $\boldsymbol{A}$ と同じ行列であることを示す．

$(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n)$ と $(\boldsymbol{f}_1, \boldsymbol{f}_2, \cdots, \boldsymbol{f}_n)$ はともに $\mathcal{V}_n$ の基底であるから，適当な正則行列 $\boldsymbol{B}$ をとれば，

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{F}_{(1)}, \boldsymbol{F}_{(2)}) &= (\boldsymbol{E}_{(1)}, \boldsymbol{E}_{(2)})\boldsymbol{B} \\ &= (\boldsymbol{E}_{(1)}\boldsymbol{B}, \boldsymbol{E}_{(2)}\boldsymbol{B})\end{aligned}$$

が成立する．

したがって

$$\begin{aligned}(1.5) \text{ の行列} &= (\boldsymbol{E}_{(1)}\boldsymbol{B}, \boldsymbol{O})\boldsymbol{B}^{-1}(\boldsymbol{E}_{(1)}, \boldsymbol{E}_{(2)})^{-1} \\ &= (\boldsymbol{E}_{(1)}, \boldsymbol{O})(\boldsymbol{E}_{(1)}, \boldsymbol{E}_{(2)})^{-1} = \boldsymbol{A}\end{aligned}$$

となって，$\boldsymbol{A}$ は基底のとり方に依存しない． （終）

なお (1.3) から，$\boldsymbol{E}_{(1)}$ の列ベクトルが $\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ の基底，$\boldsymbol{E}_{(2)}$ の列ベクトルが $\mathcal{N}(\boldsymbol{A})$ の基底となっていることは明かである．

命題 1・4 の系 1 階数 r の n 次のベキ等行列 $\boldsymbol{A}$ に対して，適当な正則行列 $\boldsymbol{B}$ をとれば

$$\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}_{r\times(n-r)} \\ \boldsymbol{O}_{(n-r)\times r} & \boldsymbol{O}_{(n-r)\times(n-r)} \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

ただしこの式の右辺は，$r=0$ のとき $\boldsymbol{O}_{n\times n}$，$r=n$ のとき $\boldsymbol{I}_n$ とする．

証明 $\mathcal{M}(\boldsymbol{A}) = \mathcal{V}_{(1)}$，$\mathcal{N}(\boldsymbol{A}) = \mathcal{V}_{(2)}$

とおけば，命題 1·4 の記号を使うとき

$$A=(E_{(1)}, O)(E_{(1)}, E_{(2)})^{-1}$$
$$=(E_{(1)}, E_{(2)})\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}(E_{(1)}, E_{(2)})^{-1}.$$

ここで $B=(E_{(1)}, E_{(2)})$ にとって，上の両辺に対して左から B^{-1}，右から B をかければ (1.6) が導かれる．　(終)

命題 1·4 の系 2　ベキ等行列 A の階数が r ならば，trace $A=r$.

証明　(1.6) を成立させる正則行列 B について，

$$\operatorname{trace} A=\operatorname{trace}(ABB^{-1})=\operatorname{trace}(B^{-1}AB)=r. \qquad \text{(終)}$$

つぎに行列 A がベキ等で対称ならば，命題 1·3, 1·4 と命題 1·1 の系2から，ただちにつぎの結果が出る．

命題 1·5　(i)　A が対称なベキ等行列のとき，A は $\mathcal{M}(A)$ 上への正射影行列，$I-A$ は $\mathcal{N}(A)$ 上への正射影行列である．

(ii)　$\mathcal{V}_n=\mathcal{V}_{(1)}\oplus\mathcal{V}_{(2)}$，$\mathcal{V}_{(1)}\perp\mathcal{V}_{(2)}$ のとき，$\mathcal{V}_{(1)}$ 上への正射影行列はただ一つ存在して，この行列は対称なベキ等行列である．

証明　(ii) の最後の部分だけを示せばよい．それには命題 1·4 の記号で $\mathcal{V}_{(1)}\perp\mathcal{V}_{(2)}$ のとき (1.2)の A について $A=A'$ すなわち

$$(E_{(1)}, O)(E_{(1)}, E_{(2)})^{-1}=\begin{pmatrix} E_{(1)}' \\ E_{(2)}' \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} E_{(1)}' \\ O \end{pmatrix} \tag{1.7}$$

を示せばよい．

$(E_{(1)}, E_{(2)})$ は正則行列であるから，(1.7) の両辺に対して右から $(E_{(1)}, E_{(2)})$，左から $\begin{pmatrix} E_{(1)}' \\ E_{(2)}' \end{pmatrix}$ をかけて導かれる

$$\begin{pmatrix} E_{(1)}' \\ E_{(2)}' \end{pmatrix}(E_{(1)}, O)=\begin{pmatrix} E_{(1)}' \\ O \end{pmatrix}(E_{(1)}, E_{(2)}) \tag{1.8}$$

と (1.7) とは同等である．

そして (1.8) が成立するための必要十分条件は $E_{(1)}'E_{(2)}=O$ である

が，これは $\mathscr{V}_{(1)} \perp \mathscr{V}_{(2)}$ と同等である． （終）

つぎの結果は統計の最小二乗法を理解するときに有用である．

命題 1·5 の系 $\boldsymbol{B} \in \mathscr{R}^{n \times r}$, $\operatorname{rank} \boldsymbol{B} = r \geqq 1$ のとき，$\mathscr{M}(\boldsymbol{B})$ 上への正射影行列は $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}'$ である．

証明　まず $r<n$ の場合を考える．命題 1·5 (ii) で $\mathscr{V}_{(1)} = \mathscr{M}(\boldsymbol{B})$, $\boldsymbol{E}_{(1)} = \boldsymbol{B}$ にとり，$\mathscr{V}_{(2)} = \mathscr{M}(\boldsymbol{B})^{\perp}$ の基底から $\boldsymbol{E}_{(2)}$ を作り，記号を簡単にするためにこれを $\boldsymbol{C}$ と書けば $\boldsymbol{B}'\boldsymbol{C} = \boldsymbol{O}$ である．したがって

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{B}' \\ \boldsymbol{C}' \end{pmatrix} (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B}'\boldsymbol{B} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{C}'\boldsymbol{C} \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

ここで命題 1·1 の系 1 により，$\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}'\boldsymbol{C}$ の階数はそれぞれ $r, n-r$ であってこれら二つの行列は正則で，逆行列が存在する．そこで (1.9) の両辺に対して左から $\begin{pmatrix} \boldsymbol{B}'\boldsymbol{B} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{C}'\boldsymbol{C} \end{pmatrix}^{-1}$ を，右から $(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C})^{-1}$ をかければ

$$\begin{pmatrix} (\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & (\boldsymbol{C}'\boldsymbol{C})^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{B}' \\ \boldsymbol{C}' \end{pmatrix} = (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C})^{-1} \tag{1.10}$$

他方 $\mathscr{M}(\boldsymbol{B}) = \mathscr{V}_{(1)}$ 上への正射影行列は (1.2) により

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= (\boldsymbol{E}_{(1)}, \boldsymbol{O})(\boldsymbol{E}_{(1)}, \boldsymbol{E}_{(2)})^{-1} \\ &= (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{O})(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C})^{-1} \end{aligned}$$

であるが，この右辺へ (1.10) を代入して

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{O}) \begin{pmatrix} (\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & (\boldsymbol{C}'\boldsymbol{C})^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{B}' \\ \boldsymbol{C}' \end{pmatrix} \\ &= \boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}' \end{aligned}$$

を得る．

最後に $r=n$ の場合には，$\boldsymbol{B}$ は正則行列で $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}' = \boldsymbol{I}_n = \boldsymbol{A}$ となる． （終）

例 1·3　$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{1}_n$ のとき，$\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B} = n$ であるから，$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ の $\mathscr{M}(\boldsymbol{1}_n)$ 上への正射

影は，$\bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i$ と書くとき，

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}'\boldsymbol{x}=\frac{1}{n}\begin{pmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ 1 & 1 & \cdots & 1\\ & \cdots\cdots\cdots\cdots & & \\ 1 & 1 & \cdots & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_n\end{pmatrix}=\bar{x}\mathbf{1}_n.$$

例 1・4　上記の $\boldsymbol{x}$ について $\boldsymbol{B}=(\mathbf{1},\boldsymbol{x})\in\mathcal{R}^{n\times 2}$，rank $\boldsymbol{B}=2$ のとき，

$$\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}\mathbf{1}'\\ \boldsymbol{x}'\end{pmatrix}(\mathbf{1},\boldsymbol{x})=\begin{pmatrix}n & \sum_{i=1}^{n}x_i\\ \sum_{i=1}^{n}x_i & \sum_{i=1}^{n}x_i^2\end{pmatrix}.$$

この行列は正則であるから

$$\det(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})=n\sum_{i=1}^{n}x_i^2-\left(\sum_{i=1}^{n}x_i\right)^2=n\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2\neq 0,$$

$$(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}=\frac{1}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}\begin{pmatrix}\sum_{i=1}^{n}x_i^2/n & -\bar{x}\\ -\bar{x} & 1\end{pmatrix}.$$

$\boldsymbol{y}=\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_n\end{pmatrix}$ の $\mathcal{M}((\mathbf{1},\boldsymbol{x}))$ 上への正射影は，$\bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i$ と書くとき

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}'\boldsymbol{y}=\hat{\alpha}\mathbf{1}+\hat{\beta}\boldsymbol{x}.$$

ただし

$$\hat{\alpha}=\bar{y}-\hat{\beta}\bar{x}$$

$$\hat{\beta}=\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}$$

と計算される．

§2　一般逆行列

定義 2・1　$\boldsymbol{A}\in\mathcal{R}^{m\times n}$ が与えられたとき，$\boldsymbol{X}\in\mathcal{R}^{n\times m}$ を未知行列として，

$$AXA=A \tag{2.1}$$

$$XAX=X \tag{2.2}$$

$$(AX)'=AX \tag{2.3}$$

$$(XA)'=XA \tag{2.4}$$

のうちの任意の n 個 $(1\leqq n\leqq 4)$ の式番号を $(2.i_1), (2.i_2), \cdots, (2.i_n)$ とする．これらの n 個から成る連立行列方程式の特殊解を $A^{(i_1,i_2,\cdots,i_n)}$，特殊解全部の集合を $\{A^{(i_1,i_2,\cdots,i_n)}\}$，一般解を $A^{\{i_1,i_2,\cdots,i_n\}}$ と書く．

さらに解行列の階数を指定する必要のある場合には，階数 s の特殊解を $A_{[s]}{}^{(i_1,i_2,\cdots,i_n)}$，その集合を $\{A_{[s]}{}^{(i_1,i_2,\cdots,i_n)}\}$，一般解を $A_{[s]}{}^{\{i_1,i_2,\cdots,i_n\}}$ と記す．

とくに $A^{(1)}$, $\{A^{(1)}\}$ を Rao の一般逆行列とよび，これらを A^-, $\{A^-\}$ で示し，階数 s の条件をみたすものを $A_{[s]}{}^-$, $\{A_{[s]}{}^-\}$ と書く．

また $A^{(1,2,3,4)}$, $\{A^{(1,2,3,4)}\}$ を Moore-Penrose の一般逆行列とよび，A^+, $\{A^+\}$ で示す．

特殊解全部の集合は内容的には一般解と同じであるが，特殊解としての行列の集合と方程式の解との差を考慮して，別の記号とした．

定義からただちにつぎの結果が導かれる．

命題 2·1 $A\in\mathcal{R}^{m\times n}$ が与えられたとき，

(i) $(A^{\{1\}})'=(A')^{\{1\}}$

(ii) $(A^{\{2\}})'=(A')^{\{2\}}$

(iii) $(A^{\{3\}})'=(A')^{\{4\}}$

(iv) $(A^{\{4\}})'=(A')^{\{3\}}$

証明 (2.1) を転置した $A'X'A'=A'$ から (i) が出る．他も同様．

(終)

命題 2·1 の系 1 $A\in\mathcal{R}^{m\times n}$ が与えられたとき，

(i) $(A^{\{1,2\}})'=(A')^{\{1,2\}}$

$(A^{\{1,3\}})'=(A')^{\{1,4\}}$

$(A^{\{1,4\}})'=(A')^{\{1,3\}}$

$(A^{\{2,3\}})'=(A')^{\{2,4\}}$

$(A^{\{2,4\}})'=(A')^{\{2,3\}}$

$(A^{\{3,4\}})'=(A')^{\{3,4\}}$

(ii)　$(A^{\{1,2,3\}})'=(A')^{\{1,2,4\}}$

$(A^{\{1,2,4\}})'=(A')^{\{1,2,3\}}$

$(A^{\{1,3,4\}})'=(A')^{\{1,3,4\}}$

$(A^{\{2,3,4\}})'=(A')^{\{2,3,4\}}$

(iii)　$(A^{\{1,2,3,4\}})'=(A')^{\{1,2,3,4\}}$

命題 2・1 の系 2　A が n 次の対称行列のとき，$\{A^-\}$ が空集合でないならば，対称行列であるような A^- が存在する．

証明　ある A^- について，A の対称性から $A(A^-)'A=A$ が成立する．したがって

$\frac{1}{2}[A^-+(A^-)']$ は (2.1) をみたし，かつ対称である．　(終)

命題 2・2　(i)　任意の $A\in\mathcal{R}^{m\times n}$ に対して行列方程式 (2.1) は解をもつ．

(ii)　このとき $\operatorname{rank} A=r$ ならば，$A^{\{1\}}$ は $mn-r^2$ 個の任意定数を含む．

証明　(i)　(2.1) を通常の連立 1 次方程式の形としてあらわすために，A および X を列ベクトルで

$$\underset{m\times n}{A}=(a_1, a_2, \cdots, a_n)$$

$$\underset{n\times m}{X}=(x_1, x_2, \cdots, x_m)$$

と記し，さらに

$$\boldsymbol{a}_j=\begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix} \qquad j=1,2,\cdots,n$$

$$\boldsymbol{x}_i=\begin{pmatrix} x_{1i} \\ x_{2i} \\ \vdots \\ x_{ni} \end{pmatrix} \qquad i=1,2,\cdots,m$$

と書けば，

$$(2.1)\ \text{左辺}=\boldsymbol{A}\left(\sum_{i=1}^{m} a_{i1}\boldsymbol{x}_i,\ \sum_{i=1}^{m} a_{i2}\boldsymbol{x}_i,\ \cdots,\ \sum_{i=1}^{m} a_{in}\boldsymbol{x}_i\right)$$
$$=\left(\sum_{i=1}^{m} a_{i1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i,\ \sum_{i=1}^{m} a_{i2}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i,\ \cdots,\ \sum_{i=1}^{m} a_{in}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i\right)$$

であるから，この行列の

$$\text{第 } j \text{ 列}=\sum_{i=1}^{m} a_{ij}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i=(a_{1j}\boldsymbol{A},\ a_{2j}\boldsymbol{A},\ \cdots,\ a_{mj}\boldsymbol{A})\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \boldsymbol{x}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_m \end{pmatrix}$$

となる．(2.1) によればこれが $\boldsymbol{a}_j$ に等しいから，(2.1) は

$$\begin{pmatrix} a_{11}\boldsymbol{A},\ a_{21}\boldsymbol{A},\ \cdots,\ a_{m1}\boldsymbol{A} \\ a_{12}\boldsymbol{A},\ a_{22}\boldsymbol{A},\ \cdots,\ a_{m2}\boldsymbol{A} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{1n}\boldsymbol{A},\ a_{2n}\boldsymbol{A},\ \cdots,\ a_{mn}\boldsymbol{A} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \boldsymbol{x}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{x}_m \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_n \end{pmatrix} \qquad (2.5)$$

と同等である．

これを $x_{ji}(j=1,2,\cdots,n\,;i=1,2,\cdots,m)$ についての連立1次方程式とみるとき，$j=1,2,\cdots,n$ に対して

$$\boldsymbol{a}_j\in\mathcal{M}(a_{1j}\boldsymbol{A},\ a_{2j}\boldsymbol{A},\ \cdots,\ a_{mj}\boldsymbol{A})$$

であるから (2.5) は可解である．ただし上の $\mathcal{M}(\quad)$ は $m\times(mn)$ 型の行列の列ベクトル空間を示す．

(2.5) 左辺の係数行列は $mn\times mn$ 型であって，行列の直積の記号を使

えば $A'\otimes A$ とあらわされることを注意しておく.

（ii） $\mathrm{rank}\, A=r$ のとき, $A'\otimes A$ の階数が r^2 となることを示せばよい. ただし $r=0$ の場合には $A=O$ となって明かであるから, 以下では $r\geqq 1$ の場合を考える.

A のはじめの r 個の列ベクトルが1次独立であると仮定しても一般性を失わない. このとき

$$A_1=(a_1, a_2, \cdots, a_r)=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1r} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2r} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mr} \end{pmatrix}$$

と書けば,

$$\left.\begin{array}{l} j=r+1,\ r+2, \cdots, n \text{ に対して } a_j \text{ は } A_1 \text{ の列ベク} \\ \text{トルの1次結合としてあらわされる.} \end{array}\right\} \tag{2.6}$$

$\mathrm{rank}\, A_1=r$ であるから, A_1 の m 個の行ベクトルのなかに, r 次元ベクトル空間で1次独立のものが r 個存在する. これらが $i_1, i_2, \cdots, i_r$ 番目の行ベクトルであるとすれば,

$$\begin{pmatrix} a_{i_11}, a_{i_12}, \cdots, a_{i_1r}, \cdots, a_{i_1n} \\ a_{i_21}, a_{i_22}, \cdots, a_{i_2r}, \cdots, a_{i_2n} \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{i_r1}, a_{i_r2}, \cdots, a_{i_rr}, \cdots, a_{i_rn} \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

は r 個の n 次元行ベクトルとして1次独立である. そして $\mathrm{rank}\, A=r$ であったから, もとの A の任意の n 次元行ベクトルはこれら r 個の行ベクトルの1次結合としてあらわされる.

したがって

$$\mathcal{M}(A'\otimes A)=\mathcal{M}\begin{pmatrix} a_{i_11}A, & a_{i_21}A, & \cdots, & a_{i_r1}A \\ a_{i_12}A, & a_{i_22}A, & \cdots, & a_{i_r2}A \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i_1n}A, & a_{i_2n}A, & \cdots, & a_{i_rn}A \end{pmatrix} \tag{2.8}$$

が出て, (2.6) を考慮すれば

$$(2.8)\text{ 右辺}=\mathcal{M}\begin{pmatrix} a_{i_11}A_1, & a_{i_21}A_1, & \cdots, & a_{i_r1}A_1 \\ a_{i_12}A_1, & a_{i_22}A_1, & \cdots, & a_{i_r2}A_1 \\ \vdots & \vdots & & \\ a_{i_1n}A_1, & a_{i_2n}A_1, & \cdots, & a_{i_rn}A_1 \end{pmatrix} \qquad (2.9)$$

となる．(2.9) 右辺の（　）内は $mn\times r^2$ 型の行列であるが，以下ではこの行列の r^2 個の列ベクトルが1次独立であることを証明する．

そのためには，仮りに r 個の r 次元列ベクトル $\boldsymbol{c}_1, \boldsymbol{c}_2, \cdots, \boldsymbol{c}_r$ に対して

$$\begin{pmatrix} a_{i_11}A_1, & a_{i_21}A_1, & \cdots, & a_{i_r1}A_1 \\ a_{i_12}A_1, & a_{i_22}A_1, & \cdots, & a_{i_r2}A_1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i_1n}A_1, & a_{i_2n}A_1, & \cdots, & a_{i_rn}A_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_1 \\ \boldsymbol{c}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{c}_r \end{pmatrix}=\underset{mn\times 1}{O} \qquad (2.10)$$

が成立するとすれば，

$$\boldsymbol{c}_1=\boldsymbol{c}_2=\cdots=\boldsymbol{c}_r=\boldsymbol{0}$$

が導かれることを示せばよい．

$$\boldsymbol{c}_l=\begin{pmatrix} c_{1l} \\ c_{2l} \\ \vdots \\ c_{rl} \end{pmatrix} \qquad l=1, 2, \cdots, r$$

と書けば

$$(2.10)\text{ 左辺}=\begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{r} a_{i_j1}A_1\boldsymbol{c}_j \\ \sum_{j=1}^{r} a_{i_j2}A_1\boldsymbol{c}_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{r} a_{i_jn}A_1\boldsymbol{c}_j \end{bmatrix}$$

となり，(2.10) は

$$\sum_{j=1}^{r} a_{i_jh}A_1\boldsymbol{c}_j=\underset{m\times 1}{O}, \qquad h=1, 2, \cdots, n$$

と同等である．この条件は

$$\sum_{j=1}^{r}\sum_{k=1}^{r} a_{i_jh}c_{kj}\boldsymbol{a}_k=\underset{m\times 1}{O}, \qquad h=1, 2, \cdots, n$$

にほかならないが，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_r$ が1次独立であることに注目すれば，

$$\sum_{j=1}^{r} a_{i_j h} c_{kj} = 0, \qquad h=1,2,\cdots,n\,;k=1,2,\cdots,r$$

が導かれる．これは

$$\begin{pmatrix} a_{i_1 1} & a_{i_2 1} & \cdots & a_{i_r 1} \\ a_{i_1 2} & a_{i_2 2} & \cdots & a_{i_r 2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i_1 n} & a_{i_2 n} & \cdots & a_{i_r n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k1} \\ c_{k2} \\ \vdots \\ c_{kr} \end{pmatrix} = \underset{n\times 1}{\boldsymbol{O}}, \qquad k=1,2,\cdots,r \tag{2.11}$$

にほかならないが，(2.7) の r 個の行ベクトルが1次独立であったから，(2.11) から

$$c_{kj}=0, \qquad j=1,2,\cdots,r\,;k=1,2,\cdots,r$$

が出て，証明された．　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　(終)

命題 2·2 の系　n 次の正方行列 $\boldsymbol{A}$ が正則のとき，$\{\boldsymbol{A}^{(1)}\}$ の元はただ一つで，それは通常の逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ にほかならない．

証明は rank $\boldsymbol{A}=n$ から，$\boldsymbol{A}^{(1)}$ に含まれる任意定数が $n^2-n^2=0$ 個となることに注目すればよい．

以下では $\boldsymbol{A}^{(1)}$ に対して順次に条件を課して $\boldsymbol{A}^{(1,2,3,4)}$ に到ることを考えるが，つぎのことを前提する．

前提条件 I　$\boldsymbol{A} \in \mathcal{R}^{m\times n}$，ただし rank $\boldsymbol{A}=r$ が与えられている．$\boldsymbol{A}$ は適当な正則行列 $\boldsymbol{P} \in \mathcal{R}^{m\times m}$，$\boldsymbol{Q} \in \mathcal{R}^{n\times n}$ によって

$$\boldsymbol{PAQ} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}_{r\times(n-r)} \\ \boldsymbol{O}_{(m-r)\times r} & \boldsymbol{O}_{(m-r)\times(n-r)} \end{pmatrix} \tag{2.12}$$

と変換されるが，以下の推論を通じて (2.12) 右辺の結果を与える変換行列 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{Q}$ を一定に保つものとする．

命題 2·3

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{Y} \\ \boldsymbol{U} & \boldsymbol{Z} \end{pmatrix} \boldsymbol{P} \tag{2.13}$$

ここで $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ はそれぞれ $(n-r)\times r$，$r\times(m-r)$，$(n-r)\times(m-r)$ 型の任意行列とする．ただし $r=0$ の場合には $\boldsymbol{I}_r, \boldsymbol{U}, \boldsymbol{Y}$ が，$r=n$ また

は m の場合には Y, Z ないし U, Z が消える．(この種の注意は以下の命題では省略する．)

証明 (2.12) からただちに

$$A=P^{-1}\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}Q^{-1} \tag{2.14}$$

が導かれ，(2.13) が (2.1) を満たすことは容易に確かめられる．

(2.13) に含まれる任意定数の個数は，$(n-r)\times r+r\times(m-r)+(n-r)\times(m-r)=mn-r^2$ 個であるから，命題 2•2 (ii) によって (2.13) 右辺が (2.1) の一般解を与える． (終)

ここで後の便宜のために，(2.13)(2.14) から導かれるつぎの結果を記しておく．

$$AA^{(1)}=P^{-1}\begin{pmatrix} I_r & Y \\ O & O \end{pmatrix}P \tag{2.15}$$

$$A^{(1)}A=Q\begin{pmatrix} I_r & O \\ U & O \end{pmatrix}Q^{-1} \tag{2.16}$$

例 2•1

$$m=3,\quad n=4,\quad A=\begin{pmatrix} 0 & 2 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 4 & 3 \end{pmatrix}$$

とする．まず行に対する操作による掃出しを行って，第1表に見るように

$$P=\begin{pmatrix} -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad と \quad PA=K=\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1/2 & 3/2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

を得る．この表の左側の↓は掃出しを行う順序，○印は掃出しの軸となる元を示す．

つぎに K の列に対する操作によって，第2表のように

$$Q=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1/2 & -3/2 \\ 0 & 1 & -3/2 & -1/2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

を求める．

第1表

A				*I*		
0	2	3	1	1	0	0
1	1	1	2	0	1	0
1	3	4	3	0	0	1
0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
1	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	0
1	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	0	1
0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
1	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	0
0	0	0	0	-1	-1	1
1	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	0
0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
0	0	0	0	-1	-1	1
K				*P*		

第2表 ⟶

	1	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	0	0	0	1	0	0	0	
K	0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	1	0	0	$\begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	1	0	0	0	1	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	1	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	
I	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	$-\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	*Q*
	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	0	
	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	1	

第3表

A			I			
2	2	4	1	0	0	0
4	2	6	0	1	0	0
5	2	7	0	0	1	0
6	0	6	0	0	0	1
1	1	2	$\frac{1}{2}$	0	0	0
0	−2	−2	−2	1	0	0
0	−3	−3	$-\frac{5}{2}$	0	1	0
0	−6	−6	−3	0	0	1
1	0	1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0
0	1	1	1	$-\frac{1}{2}$	0	0
0	0	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$	1	0
0	0	0	3	−3	0	1
K			P			

第4表 ⟶

K	1	0	1	1	0	0	1	0	0	$\begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
	0	1	1	0	1	1	0	1	0	
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
	0	0	0	0	0	0	0	0	0	
I	1	0	0	1	0	−1	1	0	−1	Q
	0	1	0	0	1	0	0	1	−1	
	0	0	1	0	0	1	0	0	1	

$\boldsymbol{P}, \boldsymbol{Q}$ の逆行列は上に得た結果から

$$\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{pmatrix}0 & 2 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 3 & 1\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{Q}^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{3}{2}\\ 0 & 1 & \frac{3}{2} & \frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

と計算される.

例 2・2

$$m=4,\qquad n=3,\qquad \boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 2 & 4\\ 4 & 2 & 6\\ 5 & 2 & 7\\ 6 & 0 & 6\end{pmatrix}$$

の場合を第3表と第4表に示す.

この場合は

$$\boldsymbol{P}^{-1}=\begin{pmatrix}2 & 2 & 0 & 0\\ 4 & 2 & 0 & 0\\ 5 & 2 & 1 & 0\\ 6 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{Q}^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

である.

命題 2・4

$$\boldsymbol{A}^{\{1,2\}}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r\\ \boldsymbol{U}\end{pmatrix}(\boldsymbol{I}_r,\ \boldsymbol{Y})\boldsymbol{P} \tag{2.17}$$

ただし $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{Y}$ は命題 2・3 と同じ.

証明　(2.13) 右辺を $\boldsymbol{X}$ とみて

$$\boldsymbol{XAX}=\boldsymbol{X} \tag{2.2}$$

に代入し, $\boldsymbol{A}$ として (2.14) を使うと

$$\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{Y}\\ \boldsymbol{U} & \boldsymbol{Z}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{Y}\\ \boldsymbol{U} & \boldsymbol{Z}\end{pmatrix}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{Y}\\ \boldsymbol{U} & \boldsymbol{Z}\end{pmatrix}\boldsymbol{P} \tag{2.18}$$

この式の両辺に対して左から $\boldsymbol{Q}^{-1}$ を, 右から $\boldsymbol{P}^{-1}$ をかけて整理すれば,

(2. 18) と同等な

$$\begin{pmatrix} I_r & Y \\ U & UY \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & Y \\ U & Z \end{pmatrix}$$

を得る.

したがって (2. 1) (2. 2) の二つの式が成立することと, (2. 13) の U, Y, Z の間に $Z=UY$ という関係が成立することが同等になって求める結果を得る. (終)

なお $A^{\{1,2\}}$ は A の反射的一般逆行列 (reflexive generalized inverse) とよばれている.

命題 2・4 の系 $X \in \{A^{(1)}\}$ ならば,

$$X \in \{A^{(1,2)}\} \Leftrightarrow \mathrm{rank}\, X = r.$$

証明は (2. 13) で $Z=UY$ の成立することが, $\mathrm{rank}\, A^{(1)}=r$ と同等であることに注目すればよい.

命題 2・5

$$A^{\{1,3\}} = Q\begin{pmatrix} I_r & -S_{12}S_{22}^{-1} \\ U & Z \end{pmatrix}P \qquad (2\cdot19)$$

ただし U, Z は命題 2・3 と同じ. $S_{ij}(i, j=1, 2)$ は

$$PP' = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \qquad (2. 20)$$

から定まる行列であって, $S_{11}, S_{12}, S_{21}, S_{22}$ の型はそれぞれ順に $r\times r$, $r\times(m-r)$, $(m-r)\times r$, $(m-r)\times(m-r)$ とする.

証明

$$(AX)' = AX \qquad (2. 3)$$

の X に (2. 13) 右辺を代入した結果は, (2. 15) から

$$P'\begin{pmatrix} I_r & O \\ Y' & O \end{pmatrix}(P^{-1})' = P^{-1}\begin{pmatrix} I_r & Y \\ O & O \end{pmatrix}P$$

となる. この両辺に対して左から P を, 右から P' をかけると, 上の式と同等なつぎの関係を得る.

$$PP'\begin{pmatrix} I_r & O \\ Y' & O \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} I_r & Y \\ O & O \end{pmatrix}PP' \tag{2.21}$$

ここで (2.20) の記号を使って書きなおせば, (2.21) は

$$\begin{pmatrix} S_{11}+S_{12}Y' & O \\ S_{21}+S_{22}Y' & O \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} S_{11}+YS_{21} & S_{12}+YS_{22} \\ O & O \end{pmatrix} \tag{2.22}$$

となる. これは

$$\left.\begin{aligned} &S_{11}+S_{12}Y'=S_{11}+YS_{21} \\ &S_{12}+YS_{22}=O \end{aligned}\right\} \tag{2.23}$$

と同等であるが, PP' が正値定符号の対称行列であることから, (2.23) は $S_{12}+YS_{22}=O$, すなわち

$$Y=-S_{12}S_{22}^{-1} \tag{2.24}$$

と同等になる. これで (2.19) が導かれた.　(終)

つぎの命題も同じようにして出る.

命題 2･6

$$A^{\{1,4\}}=Q\begin{pmatrix} I_r & Y \\ -T_{22}^{-1}T_{21} & Z \end{pmatrix}P \tag{2.25}$$

ただし Y, Z は命題 2･3 と同じ. $T_{ij}(i, j=1, 2)$ は

$$Q'Q=\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \tag{2.26}$$

から定まる行列であって, $T_{11}, T_{12}, T_{21}, T_{22}$ の型はそれぞれ順に $r\times r$, $r\times(n-r)$, $(n-r)\times r$, $(n-r)\times(n-r)$ とする.

なお (2.15) (2.16) を考えると, $A^{\{1,3\}}, A^{\{1,4\}}$ の多義性にもかかわらず, $AA^{\{1,3\}}$ と $A^{\{1,4\}}A$ とは一意的に定まることを注意しておく.

命題 2･3 以下の結果からつぎの命題が容易に導かれる.

命題 2･7　命題 2･3 の U, Y, Z, 命題 2･5 の S_{ij}, 命題 2･6 の T_{ij} $(i, j=1, 2)$ によって,

$$A^{\{1,2,3\}}=Q\begin{pmatrix} I_r \\ U \end{pmatrix}(I_r,\ -S_{12}S_{22}^{-1})P$$

$$A^{\{1,2,4\}}=Q\begin{pmatrix} I_r \\ -T_{22}^{-1}T_{21} \end{pmatrix}(I_r,\ Y)P$$

$$A^{\{1,3,4\}}=Q\begin{pmatrix} I_r & -S_{12}S_{22}^{-1} \\ -T_{22}^{-1}T_{21} & Z \end{pmatrix}P$$

$$A^{\{1,2,3,4\}}=Q\begin{pmatrix} I_r \\ -T_{22}^{-1}T_{21} \end{pmatrix}(I_r,\ -S_{12}S_{22}^{-1})P$$

例 2·3　上に述べた例 2·1 についての計算を示すと，そこで得た P, Q から

$$PP'=\begin{pmatrix} \frac{5}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 3 \end{pmatrix}$$

$$-S_{12}S_{22}^{-1}=-\frac{1}{3}\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}=\frac{1}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$Q'Q=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \\ 0 & 1 & -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & \frac{7}{2} & 0 \\ -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{7}{2} \end{pmatrix}$$

$$-T_{22}^{-1}T_{21}=-\frac{2}{7}\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \\ -\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}=\frac{1}{7}\begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A^{\{1,2,3,4\}}=\frac{1}{21}\begin{pmatrix}-4 & 5 & 1\\ 2 & -1 & 1\\ 5 & -4 & 1\\ -5 & 7 & 2\end{pmatrix}$$

つぎの命題は後に必要となるので，ここで述べておく．

命題 2・8　A が n 次の非負値半定符号の対称行列のとき，対称行列であるような $A^{(1)}, A^{(1,2)}, A^{(1,3)}, A^{(1,4)}, A^{(1,2,3)}, A^{(1,2,4)}, A^{(1,3,4)}$ が存在する．

証明　rank $A=r$ とすれば，適当な正則行列 Q をとるとき

$$Q'AQ=\begin{pmatrix}I_r & O\\ O & O\end{pmatrix}$$

が成立し，前提条件 I の (2.12) で $P=Q'$ にとることができる．したがって (2.13) で $Y=U'$, $Z=Z'$ にとれば，対称な $A^{(1)}$ を得る．他の場合も同様．　（終）

以下では上で求めた $A^{(i_1,i_2,\cdots,i_n)}$ を使って作られる射影行列について説明する．

命題 2・9　$A\in\mathcal{R}^{m\times n}$, rank $A=r$ が与えられたとき，任意の A^- を定めれば，

（i）AA^- はべキ等でその階数は r に等しく，$\mathcal{N}(AA^-)$ に沿うての $\mathcal{M}(A)=\mathcal{M}(AA^-)$ 上への射影行列である．

（ii）A^-A はべキ等でその階数は r に等しく，$\mathcal{N}(A)$ に沿うての $\mathcal{M}(A^-A)$ 上への射影行列である．

証明（i）

$$AA^-A=A \tag{2.27}$$

の右から A^- をかけて

$$AA^-AA^-=AA^-$$

を得るから，AA^- はべキ等である．

(2.27) から

$$\mathcal{M}(A)=\mathcal{M}(AA^{-}A)\subset\mathcal{M}(AA^{-})\subset\mathcal{M}(A).$$

したがって $\mathcal{M}(A)=\mathcal{M}(AA^{-})$, rank A=rank AA^{-} となる．あとは命題 1·3 による．

(ii) (2.27) の左から A^{-} をかけて

$$A^{-}AA^{-}A=A^{-}A$$

を得るから，$A^{-}A$ はベキ等である．

$$\mathcal{N}(A)=\mathcal{N}(AA^{-}A)\supset\mathcal{N}(A^{-}A)\supset\mathcal{N}(A)$$

から $\mathcal{N}(A)=\mathcal{N}(A^{-}A)$, rank A=rank $A^{-}A$ となる． (終)

命題 2·9 の系 $AA^{(1,3)}$ は $\mathcal{M}(A)$ 上への正射影行列，$A^{(1,4)}A$ は $\mathcal{M}(A')$ 上への正射影行列である．

証明　命題 1·5 (i) と命題 1·1 の $\mathcal{N}(A)^{\perp}=\mathcal{M}(A')$ から明か．

(終)

さきに命題 2·5, 2·6 について $AA^{\{1,3\}}$, $A^{\{1,4\}}A$ が一意的に定まることを注意したが，これはこれらが正射影行列であることに由来するのであった．

命題 2·10 任意の $A\in\mathcal{R}^{m\times n}$ に対して $A^{(1,2,3,4)}=A^{+}$ は一意的に定まり，rank A=rank A^{+}.

とくに A が n 次の対称行列のとき，A^{+} は対称行列である．

証明　はじめに一意性を示す．それには $G_i\in A^{\{1,2,3,4\}}$ $(i=1,2)\Longrightarrow G_1=G_2$ を言えばよい．

命題 2·9 の系から $AG_i(i=1,2)$ は $\mathcal{M}(A)$ 上への正射影行列であるから，

$$AG_1AG_2=(AG_1)(AG_2)=AG_1$$

左から G_1 をかけて (2.2) を使うと

$$G_1AG_2=G_1 \tag{2.28}$$

同じように $G_iA(i=1,2)$ は $\mathcal{M}(A')$ 上への正射影行列であるから，

$$G_1AG_2A=G_2A$$

右から G_2 をかけて (2.2) を使うと

$$G_1AG_2=G_2 \tag{2.29}$$

(2.28) (2.29) から $G_1=G_2$ が出る．

$G_1=G_2=A^+$ と書けば，(2.28) からは $\text{rank}\,A \geqq \text{rank}\,A^+$ が，$AA^+A=A$ からは $\text{rank}\,A^+ \geqq \text{rank}\,A$ が出て，両者をあわせて $\text{rank}\,A=\text{rank}\,A^+$ を得る．

とくに A が対称行列ならば，命題 2·1 の系 1 (iii) と対称性から

$$(A^+)'=(A')^+=A^+$$

を得る．　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　（終）

A^- と A^+ とは統計の書物によく登場するので上に得た結果を含めて一通りまとめておく．

命題 2·11　$A\in\mathcal{R}^{m\times n}$ が与えられたとき，任意の $(A'A)^-$ を定めれば，

(i)　$A=A(A'A)^-A'A$

(ii)　$A(A'A)^-A'$ は $\mathcal{M}(A)$ 上への正射影行列で，この行列は $(A'A)^{(1)}$ の多義性にかかわらず一意的に定まる．

証明　(i)　$[(A'A)^-]'\in\{[(A'A)']^{(1)}\}=\{(A'A)^{(1)}\}$ であるから，

$$\begin{aligned}&[A-A(A'A)^-A'A]'[A-A(A'A)^-A'A]\\&=\{I_n-A'A[(A'A)^-]'\}A'A[I_n-(A'A)^-A'A]\\&=\{A'A-A'A\}[I_n-(A'A)^-A'A]=O\end{aligned}$$

したがって (i) が出る．

(ii)　$G=(A'A)^-A'$ とおくとき，いま得た結果から $AGA=A$ である．ここで $(AG)'=AG$ を証明できれば，$G\in\{A^{(1,3)}\}$ となるから，命題 2·9 の系から $AG=A(A'A)^-A'$ は $\mathcal{M}(A)$ 上への正射影行列，命題 1·5 (ii)

の正射影行列の一意性から求める結果が出る.

以下では rank $A=r$ のとき前提条件 I による (2.14) を使って AG の対称性を証明する.

(2.14) から

$$A'A=(Q')^{-1}\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}(PP')^{-1}\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}Q^{-1} \tag{2.30}$$

ここで $(PP')^{-1}$ は正値定符号の対称行列である. これを分割して

$$(PP')^{-1}=\begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix}$$

とする. ただし $R_{11}, R_{12}, R_{21}, R_{22}$ の型はそれぞれ順に $r\times r$, $r\times(m-r)$, $(m-r)\times r$, $(m-r)\times(m-r)$ とする. 明かに $R_{11}'=R_{11}$.

(2.30) から

$$A'A=(Q')^{-1}\begin{pmatrix} R_{11} & O \\ O & O \end{pmatrix}Q^{-1} \tag{2.31}$$

(2.12) から (2.13) を導いたのと同じような論法で, (2.31) からつぎの結果が出る.

$$(A'A)^{(1)}=Q\begin{pmatrix} R_{11}^{-1} & Y \\ U & Z \end{pmatrix}Q' \tag{2.32}$$

ただし U, Y, Z はそれぞれ $(n-r)\times r$, $r\times(n-r)$, $(n-r)\times(n-r)$ 型の任意行列とする.

(2.14) と (2.32) から

$$\begin{aligned} A(A'A)^{(1)}A'&=P^{-1}\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}\begin{pmatrix} R_{11}^{-1} & Y \\ U & Z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}(P^{-1})' \\ &=P^{-1}\begin{pmatrix} R_{11}^{-1} & O \\ O & O \end{pmatrix}(P^{-1})' \end{aligned}$$

となって, $(A'A)^{(1)}$ の多義性にもかかわらず $A(A'A)^{(1)}A'$ はつねに対称行列となる. (終)

なおこの命題の (ii) は命題 1･5 の系の一般化となっていることを注意しておく.

命題 2･12　$A \in \mathcal{R}^{m\times n}$ が与えられたとき,

(i)　AA^+ は $\mathcal{M}(A)$ 上への, $I_m - AA^+$ は $\mathcal{N}(A')$ 上への正射影行列である.

(ii)　A^+A は $\mathcal{M}(A')$ 上への, $I_n - A^+A$ は $\mathcal{N}(A)$ 上への正射影行列である.

(iii)　$\mathcal{M}(A^+) = \mathcal{M}(A^+A) = \mathcal{M}(A') = \mathcal{N}(A)^\perp$

(iv)　$\mathcal{N}(A^+) = \mathcal{N}(AA^+) = \mathcal{N}(A') = \mathcal{M}(A)^\perp$

証明　(i) (ii) は命題 1･1 および 1･3 と命題 2･9 の系から既知.

(iii) については $\mathcal{M}(A^+) \supset \mathcal{M}(A^+A)$ と rank $A^+ =$ rank $A =$ rank A^+A から $\mathcal{M}(A^+) = \mathcal{M}(A^+A)$. A^+A が $\mathcal{M}(A')$ 上への正射影行列であることから $\mathcal{M}(A^+A) = \mathcal{M}(A')$. 最後の等号は命題 1･1 で既知.

(iv) については $\mathcal{N}(A^+) \subset \mathcal{N}(AA^+)$ と rank $A^+ =$ rank AA^+ から $\mathcal{N}(A^+) = \mathcal{N}(AA^+)$. AA^+ が $\mathcal{M}(A)$ 上への正射影行列であることから $\mathcal{N}(AA^+) = \mathcal{M}(A)^\perp = \mathcal{N}(A')$.　(終)

$(A^+)' = (A')^+$ を考慮すれば, (iii) (iv) からさらに $\mathcal{M}(A) = \mathcal{M}((A^+)')$, $\mathcal{N}(A) = \mathcal{N}((A^+)')$ が導かれる. これらの関係を図に示したものが第1図である.

命題 2･13　$A \in \mathcal{R}^{m\times n}$ が与えられたとき,

(i)　$(A^+)^+ = A$

(ii)　$(A^+)' = (A')^+$

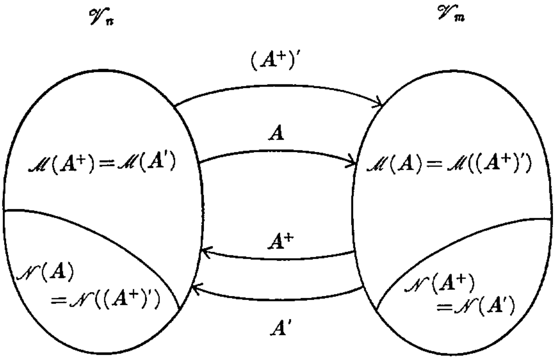
(iii)　$A^+ = (A'A)^+A' = A'(AA')^+$

(iv)　$(AA')^+ = (A^+)'A^+$

(v)　$AA^+ = AA'(AA')^+ = A(A'A)^-A' = A(A'A)^+A'$

証明　(i)～(iv) に対しては Moore-Penrose の一般逆行列を定義す

第1図



る (2.1)~(2.4) をみたすことを確かめればよい．その際命題 2·11 (i) を使う．(v) はいずれも $\mathscr{M}(A)$ 上への正射影行列になっている．(終)

以上の説明では $A^{\{1\}}$ から出発して A^+ に到達したが，$A^{\{2\}}$ から出発して同様の手法で推論することはむずかしい．ただ $A_{[s]}{}^{\{2\}}$ について知られているつぎの結果を，上で使ってきた方法で導くことはできる．

命題 2·14 $A\in\mathscr{R}^{m\times n}$, rank $A=r\geqq 1$ と $1\leqq s\leqq r$ をみたす整数 s が与えられているものとする．このとき定義 2·1 の $A_{[s]}{}^{\{2\}}=\boldsymbol{YZ}$. ただし $\boldsymbol{Y}\in\mathscr{R}^{n\times s}$, $\boldsymbol{Z}\in\mathscr{R}^{s\times m}$ は $\boldsymbol{ZAY}=\boldsymbol{I}_s$ をみたす任意行列とする．

証明　仮りに

$$XAX=X \tag{2·2}$$

をみたす $X\in\mathscr{R}^{n\times m}$, rank $X=s$ の行列 X が求められたとしよう．X に依存して定まる n 次の正則行列 P_X と，同じく X に依存して定まる m 次の正則行列 Q_X によって

$$P_XXQ_X=\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}$$

すなわち

$$X=P_X^{-1}\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}Q_X^{-1} \tag{2.33}$$

が成立する．

これを (2.2) に代入して

$$P_X^{-1}\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}Q_X^{-1}AP_X^{-1}\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}Q_X^{-1}=P_X^{-1}\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}Q_X^{-1}$$

を得るが，この結果は

$$\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}Q_X^{-1}AP_X^{-1}\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix} \tag{2.34}$$

と同等である．

ここでつぎのように行列を分割する．

$$Q_X^{-1}=\begin{pmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{pmatrix}$$

ただし Z_1, Z_2 の型はそれぞれ順に $s\times m$, $(m-s)\times m$ とする．

$$P_X^{-1}=(Y_1,\ Y_2)$$

ただし Y_1, Y_2 の型はそれぞれ順に $n\times s$, $n\times(n-s)$ とする．
(2.34) は

$$Z_1AY_1=I_s \tag{2.35}$$

と同等であり，(2.33) 右辺を

$$P_X^{-1}\begin{pmatrix} I_s \\ O \end{pmatrix}(I_s,\ O)Q_X^{-1}$$

と書き改めることにより

$$X=Y_1Z_1$$

が出る．ここで Y_1, Z_1 をそれぞれ Y, Z と書けば所題の関係式になる．

逆に $Y\in\mathcal{R}^{n\times s}$, $Z\in\mathcal{R}^{s\times m}$ が

$$ZAY=I_s \tag{2.36}$$

をみたすならば，rank $Z=s$ は明か．ここで

$$X=YZ \tag{2.37}$$

とおくとき

$$XAX=YZAYZ=X$$

から $X\in\{A^{(2)}\}$.

(2.37) から rank $X\leqq s$ が導かれる．他方 (2.36) の両辺に対して右から Z をかけて (2.37) を使えば

$$ZAYZ=ZAX=Z$$

となるから rank $X\geqq s$ が導かれて，結局 rank $X=s$ である．

したがって $X=YZ\in\{A_{[s]}{}^{(2)}\}$. (終)

命題 2·15 $A\in\mathcal{R}^{m\times n}$, rank $A=r\geqq 1$ のとき，$A_{[r]}{}^{\{2\}}=A^{\{1,2\}}$.

証明　命題 2·4 の系により

$$A^{\{1,2\}}=A_{[r]}{}^{\{1\}}$$

であるから，$A_{[r]}{}^{\{2\}}\in\{A^{(1)}\}$ を示せばよい．

命題 2·14 により $A_{[r]}{}^{\{2\}}=YZ$. ただし $Y\in\mathcal{R}^{n\times r}$, $Z\in\mathcal{R}^{r\times m}$, $ZAY=I_r$ である．このとき rank $Y=$rank $Z=r$ は明か．さらに $AY\in\mathcal{R}^{m\times r}$, rank $AY=r$ であるから $\mathcal{N}[(AY)']$ は $m-r$ 次元であって，$m-r$ 個の独立な m 次元列ベクトル $b_1, b_2, \cdots, b_{m-r}$ に対して

$$(AY)'b_i=0, \qquad i=1,2,\cdots,m-r$$

が成立する．

$B=(b_1, b_2, \cdots, b_{m-r})\in\mathcal{R}^{m\times(m-r)}$ を作れば

$$(AY)'(Z', B)=(I_r, O_{r\times(m-r)})$$

であって Z' の r 個の1次独立な列ベクトルはいずれも $\mathcal{N}[(AY)']$ に属さない．したがって (Z', B) の m 個の列ベクトルは1次独立で

$$\begin{pmatrix} Z \\ B' \end{pmatrix} AY=\begin{pmatrix} I_r \\ O_{(m-r)\times r} \end{pmatrix} \tag{2.38}$$

ここで $\begin{pmatrix} Z \\ B' \end{pmatrix} A = D \in \mathcal{R}^{m\times n}$ とおけば，まず rank $A=r \geqq$ rank D. つぎに (2.38) から rank $D \geqq r$ が出るから，rank $D=r$. (2.38) は

$$DY = \begin{pmatrix} I_r \\ O \end{pmatrix}$$

と書かれるが，$DY \in \mathcal{R}^{m\times r}$ に対して上と同様の議論をくりかえせば，$(Y, C) \in \mathcal{R}^{n\times n}$ の n 個の列ベクトルが1次独立で

$$D(Y, C) = \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix} \tag{2.39}$$

をみたすような $C \in \mathcal{R}^{n\times(n-r)}$ が存在する.

(2.38) (2.39) をあわせると

$$\begin{pmatrix} Z \\ B' \end{pmatrix} A(Y, C) = \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}$$

であって，$\begin{pmatrix} Z \\ B' \end{pmatrix} \in \mathcal{R}^{m\times m}$，$(Y, C) \in \mathcal{R}^{n\times n}$ はともに正則行列であるから，

$$(Y, C)\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Z \\ B' \end{pmatrix} = YZ$$

は命題 2·3 によって作った一つの A^- であり，求める結果が導かれたことになる.　　（終）

§3　最小セミノルム一般逆行列とセミ最小二乗一般逆行列

本節では Rao, Mitra らによって研究の進められている表記の一般逆行列について初歩的部分を解説する．そのための準備として

命題 3·1　$A \in \mathcal{R}^{m\times n}$ と m 次元列ベクトル c が与えられたとき，x を未知の n 次元列ベクトルとして

$$Ax = c \tag{3.1}$$

が解をもつための必要十分条件は，ある A^- に対してつぎの条件が成立

することである．

$$AA^{-}c=c \tag{3.2}$$

この条件が成立するとき (3.1) の一般解は

$$x=A^{-}c+(I_n-A^{-}A)z \tag{3.3}$$

によって与えられる．ただし z は n 次元の任意の列ベクトルとする．

証明　(3.1) の可解条件は $c\in\mathcal{M}(A)$ であるが，これが (3.2) と同等であることは命題 2・9 (i) により AA^{-} が $\mathcal{M}(A)$ 上への射影行列であることから明か．

つぎに (3.2) が成立するとき $A^{-}c$ は (3.1) の特殊解となる．また $A(I_n-A^{-}A)z=0$ から $(I_n-A^{-}A)z$ は $Ax=0$ をみたし，かつ $\operatorname{rank} A=r$ のとき $I_n-A^{-}A$ は $n-r$ 次元の $\mathcal{N}(A)$ 上への射影行列であるから，$(I_n-A^{-}A)z$ は $n-r$ 個の任意定数を含み，$Ax=0$ の一般解となる．したがって (3.3) は (3.1) の一般解を与える．　(終)

もう一つ準備として，

命題 3・2　N が非負値半定符号の対称行列のとき，$B^2=N$ をみたすような非負値半定符号の対称行列 B が存在する．

証明　$N\in\mathcal{R}^{n\times n}$, $\operatorname{rank} N=r$ と仮定して，N の固有値のうち正のものを $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r$ とする．適当な直交行列 Q をとれば

$$Q'NQ=\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & & & \\ & \lambda_2 & & & 0 & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \lambda_r & & \\ & & & & 0 & \\ & 0 & & & & \ddots \\ & & & & & & 0\end{bmatrix}$$

と対角化されて，

$$N=Q\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & & & \\ & \lambda_2 & & & 0 & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \lambda_r & & \\ & & & & 0 & \\ & 0 & & & & \ddots \\ & & & & & 0\end{bmatrix}Q'$$

となる.

このとき

$$B=Q\begin{bmatrix}\sqrt{\lambda_1} & & & & & \\ & \sqrt{\lambda_2} & & & 0 & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \sqrt{\lambda_r} & & \\ & & & & 0 & \\ & 0 & & & & \ddots \\ & & & & & 0\end{bmatrix}Q'$$

とおけばよい.　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　(終)

命題 3・2 の系　N が非負値半定符号の対称行列のとき, N^+ もまた非負値半定符号の対称行列で, $C^2=N^+$ をみたす非負値半定符号の対称行列 C が存在する.

証明　上の証明の記号を使うとき,

$$N^+=Q\begin{bmatrix}1/\lambda_1 & & & & & \\ & 1/\lambda_2 & & & 0 & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1/\lambda_r & & \\ & & & & 0 & \\ & 0 & & & & \ddots \\ & & & & & 0\end{bmatrix}Q'$$

この結果を証明するには, N^+ を定める四つの条件式 $NN^+N=N$, $N^+NN^+=N^+$, $(NN^+)'=NN^+$, $(N^+N)'=N^+N$ に直接代入して確かめればよい.

上の N^+ が非負値半定符号の対称行列であることは明か.

$$C=Q\begin{bmatrix} 1/\sqrt{\lambda_1} & & & & & & 0 \\ & 1/\sqrt{\lambda_2} & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & 1/\sqrt{\lambda_r} & & & \\ & & & & 0 & & \\ & 0 & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix}Q'$$

にとれば所題の結果が成立することも容易にわかる. (終)

定義 3·1 N が非負値半定符号の対称行列のとき, 命題 3·2 の B を $\sqrt{N}$ または $N^{1/2}$ と記し, 命題 3·2 の系の C を $\sqrt{N^+}$ または $(N^+)^{1/2}$ と記す.

とくに N が正値定符号の対称行列のとき, $(N^{1/2})^{-1}$ を $N^{-1/2}$ と記す.

ここで N が与えられたとき, B ないし C は一意的に定まるとは限らないが, Q をきめれば定まる. そのうちの一つを $\sqrt{N}$ ないし $\sqrt{N^+}$ としていることを注意しておく. 以下では $N^{1/2}, N^{-1/2}, N^+$ を考えるとき, これらすべてを通じて同じ Q にもとづくものを考えるものとする.

定義 3·2 $A\in\mathcal{R}^{m\times n}$ と n 次の非負値半定符号の対称行列 N が与えられている. x を未知の n 次元列ベクトル, $y\in\mathcal{M}(A)$ を与えられた既知の m 次元列ベクトルとして, 方程式

$$Ax=y \tag{3.4}$$

を考え, この方程式の解集合を $\mathcal{S}_y$ と記す.

ある $G\in\mathcal{R}^{n\times m}$ を定めるとき,

(i) 任意の $y\in\mathcal{M}(A)$ に対して $x=Gy$ が (3.4) をみたし, かつ

(ii) x を $\mathcal{S}_y$ 上で動かすとき, $x'Nx$ の最小値が任意の $y\in\mathcal{M}(A)$ に対して $x=Gy$ において実現されるとき,

G を A の最小 N セミノルム一般逆行列とよび, $A_{m(N)}^-$ と記す. さ

らにこのような G 全体の集合を $\{A_{m(N)}^{-}\}$ で示す.

とくに $N=I_n$ の場合には，名称については「N セミ」を省略して最小ノルム一般逆行列とよび，記号については添字のうち (N) を省略して，A_m^{-}, $\{A_m^{-}\}$ と書く.

命題 3・3　定義 3・2 の $\{A_{m(N)}^{-}\}$ は，つぎの二条件をみたす $G\in\mathcal{R}^{n\times m}$ 全体の集合と一致する.

$$AGA=A \tag{3.5}$$

$$(NGA)'=NGA \tag{3.6}$$

証明　はじめに $\{A_{m(N)}^{-}\}\subset\{A^{(1)}\}$ であることに注目する．すなわち定義 3・2 (i) により，ある $G\in\{A_{m(N)}^{-}\}$ を定めれば任意の $y\in\mathcal{M}(A)$ に対して $AGy=y$ が成立する．したがって $A=(a_1, a_2, \cdots, a_n)$ と列ベクトルであらわすとき，

$$AGa_i=a_i, \qquad i=1, 2, \cdots, n$$

すなわち $AGA=A$ であるから，$G\in\{A^{(1)}\}$.

つぎに (3.5) (3.6) の二条件をみたす G 全体の集合を $\mathcal{G}$ と記すとき，$\{A_{m(N)}^{-}\}\subset\mathcal{G}$ を証明する.

$G\in\{A_{m(N)}^{-}\}$ のとき $G\in\{A^{(1)}\}$ であるから，(3.3) により，定義 3・2 (ii) の 任意の $x\in\mathcal{S}_y$ は

$$x=Gy+(I_n-GA)z \tag{3.7}$$

（ただし z は n 次元の任意の列ベクトル）

とあらわされる.

さらに任意の $y=\mathcal{M}(A)$ という条件は，n 次元の任意の列ベクトル u に対して $y=Au$ と同義である.

したがって (3.7) から

$$\begin{aligned} x'Nx &= \|N^{1/2}x\|^2 \\ &= \|N^{1/2}\{GAu+(I_n-GA)z\}\|^2. \end{aligned} \tag{3.8}$$

ここで $u \in \mathcal{V}_n$, $z \in \mathcal{V}_n$ を自由に動かすときの (3.8) の最小値が $x=Gy=GAu$ で実現されるための必要十分条件は,

任意の u, z に対して

$$N^{1/2}GAu \perp N^{1/2}(I_n-GA)z$$

すなわち

$$z'(I_n-GA)'NGAu=0$$

と同等である. この条件式は

$$(I_n-GA)'NGA=O_{n\times n}$$

となるが, これを変形して

$$NGA=(GA)'NGA \tag{3.9}$$

を得る.

この式から, まず

$$NGA=A'G'NGA=(A'G'N)GA \tag{3.10}$$

が出る. つぎに (3.9) の両辺を転置して N の対称性を使い

$$A'G'N=(NGA)'GA \tag{3.11}$$

が導かれる.

(3.11) を (3.10) 最右辺に代入して, $G \in \{A^{(1)}\}$ を使えば

$$NGA=(NGA)'GAGA=(NGA)'GA \tag{3.12}$$

ここで (3.11) (3.12) の右辺同志は同じであるから, 左辺を比較して (3.6) が導かれる.

以上で $\{A_{m(N)}{}^{-}\} \subset \mathcal{G}$ が示されたから, つぎに逆の包合関係を示す.

$G \in \mathcal{G}$ ならば $G \in \{A^{(1)}\}$ であるから定義 3·2 の条件 (i) が成立することは明か.

つぎに (3.5) (3.6) から

$$\begin{aligned}(GA)'NGA&=(GA)'(NGA)'\\&=[(NGA)(GA)]'=(NGA)'=NGA\end{aligned}$$

と計算されて (3.9) が成立する.

したがって $u\in\mathcal{V}_n$, $z\in\mathcal{V}_n$ を自由に動かすとき (3.8) の最小値が $x=GAu$ で実現される. これから定義 3·2 の条件 (ii) も成立することになる.

以上で $\{A_{m(N)}^-\}=\mathcal{G}$ が証明された.　(終)

命題 3·3 の系　$A\in\mathcal{R}^{m\times n}$ が与えられたとき, $\{A_m^-\}=A^{\{1,4\}}$.

証明は $N=I_n$ のとき, (3.5) (3.6) が (2.1) (2.4) の形になることから明か.

命題 3·4　定義 3·2 の $\{A_{m(N)}^-\}$ は空ではない.

証明　(3.5) (3.6) の二条件をみたす G の存在を示す.

rank $A=r$ のとき, 前提条件 I のもとで (3.5) をみたす G は命題 2·3 (2.13) の形をとり,

$$G=Q\begin{pmatrix} I_r & Y \\ U & Z \end{pmatrix}P \tag{3.13}$$

このとき (2.16) から

$$GA=Q\begin{pmatrix} I_r & O \\ U & O \end{pmatrix}Q^{-1} \tag{3.14}$$

(3.14) の左から N をかけて

$$NGA=NQ\begin{pmatrix} I_r & O \\ U & O \end{pmatrix}Q^{-1} \tag{3.15}$$

これを転置して

$$(NGA)'=(Q')^{-1}\begin{pmatrix} I_r & U' \\ O & O \end{pmatrix}Q'N \tag{3.16}$$

(3.6) (3.15) (3.16) から

$$NQ\begin{pmatrix} I_r & O \\ U & O \end{pmatrix}Q^{-1}=(Q')^{-1}\begin{pmatrix} I_r & U' \\ O & O \end{pmatrix}Q'N$$

この条件は

$$\boldsymbol{Q'NQ}\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{U} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{U'} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\boldsymbol{Q'NQ} \tag{3.17}$$

と同等である.

$\boldsymbol{Q'NQ}=\boldsymbol{T}$ とおき，これをつぎのように分割する.

$$\boldsymbol{Q'NQ}=\boldsymbol{T}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{T}_{11} & \boldsymbol{T}_{12} \\ \boldsymbol{T}_{21} & \boldsymbol{T}_{22} \end{pmatrix} \tag{3.18}$$

ただし $\boldsymbol{T}_{11}, \boldsymbol{T}_{12}, \boldsymbol{T}_{21}, \boldsymbol{T}_{22}$ の型はそれぞれ順に $r\times r$, $r\times(n-r)$, $(n-r)\times r$, $(n-r)\times(n-r)$ とする.

(3.17) は

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{U}&=\boldsymbol{U'T}_{21} \\ \boldsymbol{T}_{21}+\boldsymbol{T}_{22}\boldsymbol{U}&=\boldsymbol{0} \end{aligned}\right\} \tag{3.19}$$

と同等である.

$\boldsymbol{T}_{22}$ は非負値半定符号の対称行列であるから，命題2·8によって対称な $\boldsymbol{T}_{22}^-$ をとることができる．この $\boldsymbol{T}_{22}^-$ によって

$$\boldsymbol{U}=-\boldsymbol{T}_{22}^-\boldsymbol{T}_{21} \tag{3.20}$$

とおけば，(3.19) 第1式が成立する．同じく第2式の成立を示すには

$$\boldsymbol{T}_{22}\boldsymbol{T}_{22}^-\boldsymbol{T}_{21}=\boldsymbol{T}_{21}$$

を示せばよいが，命題 2·9 (i) を考慮すると,

$$\boldsymbol{T}_{21} \text{ の列ベクトルが } \mathcal{M}(\boldsymbol{T}_{22}) \text{ に属すること} \tag{3.21}$$

を示せば足りる.

$\boldsymbol{T}$ は非負値半定符号の n 次の対称行列であるから，rank $\boldsymbol{T}=t$ のとき，適当な正則行列 $\boldsymbol{R}$ をとれば

$$\boldsymbol{R'TR}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_t & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}$$

と対角化される.

$$\boldsymbol{T}=(\boldsymbol{R'})^{-1}\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_t & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\boldsymbol{R}^{-1} \tag{3.22}$$

をつぎのように書きかえる．まず

$$(\boldsymbol{R}')^{-1}\begin{pmatrix} \boldsymbol{I}_t & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{pmatrix} = \boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{W}_1 \\ \boldsymbol{W}_2 \end{pmatrix} \tag{3.23}$$

ただし $\boldsymbol{W}_1, \boldsymbol{W}_2$ の型はそれぞれ $r\times n$, $(n-r)\times n$ とし，r と t の大小関係は問わない．

(3.22) (3.23) により，(3.18) は

$$\boldsymbol{T} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{T}_{11} & \boldsymbol{T}_{12} \\ \boldsymbol{T}_{21} & \boldsymbol{T}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{W}_1\boldsymbol{W}_1' & \boldsymbol{W}_1\boldsymbol{W}_2' \\ \boldsymbol{W}_2\boldsymbol{W}_1' & \boldsymbol{W}_2\boldsymbol{W}_2' \end{pmatrix}$$

となり，

$$\boldsymbol{T}_{21} = \boldsymbol{W}_2\boldsymbol{W}_1', \qquad \boldsymbol{T}_{22} = \boldsymbol{W}_2\boldsymbol{W}_2'$$

であるから，

$$\mathcal{M}(\boldsymbol{T}_{22}) = \mathcal{M}(\boldsymbol{W}_2\boldsymbol{W}_2') = \mathcal{M}(\boldsymbol{W}_2)$$

を考慮すると，(3.21) が導かれる．

結局 (3.20) の $\boldsymbol{U}$ は (3.19) をみたすから，(3.13) の $\boldsymbol{U}$ へ (3.20) を代入し，$\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ は任意行列とすれば，この $\boldsymbol{G}$ は (3.5) (3.6) をみたす．

（終）

命題 3·4 の系　定義 3·2 において，$\boldsymbol{N}$ が正値定符号の対称行列の場合には，$\boldsymbol{A}_{m(N)}^-$ は一意的に定まらないにもかかわらず，$\boldsymbol{A}_{m(N)}^-\boldsymbol{A}$ は一意的に定まる．

証明　$\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{N}\boldsymbol{Q}$ が正値定符号の対称行列となるから，(3.20) は

$$\boldsymbol{U} = -\boldsymbol{T}_{22}^{-1}\boldsymbol{T}_{21}$$

として一意的に定まり，かつ (3.14) から $\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}$ は任意行列 $\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ を含まない．

（終）

定義 3·3　$\boldsymbol{A} \in \mathcal{R}^{m\times n}$ と m 次元列ベクトル $\boldsymbol{c}$ および m 次の非負値半定符号の対称行列 $\boldsymbol{M}$ が与えられている．$\boldsymbol{x}$ を未知の n 次元列ベクトルとして

$$(\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{c})'\boldsymbol{M}(\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{c})$$

を最小にする $\boldsymbol{x}$ を，

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{c} \tag{3.24}$$

についての $\boldsymbol{M}$ セミ最小二乗解とよぶ．ただし，方程式 (3.24) は可解であるとは限らないものとする．

定義 3･4 $\boldsymbol{A}\in\mathcal{R}^{m\times n}$ と m 次の非負値半定符号の対称行列 $\boldsymbol{M}$ が与えられている．

ある $\boldsymbol{G}\in\mathcal{R}^{n\times m}$ を定めるとき，任意の m 次元列ベクトル $\boldsymbol{y}$ に対して $\boldsymbol{Gy}$ が

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y} \tag{3.25}$$

についての $\boldsymbol{M}$ セミ最小二乗解となるならば，この $\boldsymbol{G}$ を $\boldsymbol{A}$ の $\boldsymbol{M}$ セミ最小二乗行列とよび，$\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}$ と記す．さらに，このような $\boldsymbol{G}$ 全体の集合を $\{\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}\}$ で示す．

集合 $\{\boldsymbol{A}^{(1)}\}\cap\{\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}\}$ を $\{\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}^{-}\}$ と書き，この集合に属する元を，$\boldsymbol{A}$ の $\boldsymbol{M}$ セミ最小二乗一般逆行列とよぶ．

とくに $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{I}_m$ の場合には，名称については「$\boldsymbol{M}$ セミ」を省略して最小二乗一般逆行列とよび，記号については添字の ($\boldsymbol{M}$) を省略して，$\boldsymbol{A}_l^{-}$，$\{\boldsymbol{A}_l^{-}\}$ と記す．

定義から明かに $\{\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}^{-}\}$ は，つぎの二条件をみたす $\boldsymbol{G}\in\mathcal{R}^{n\times m}$ 全体の集合である．

(i) 任意の $\boldsymbol{y}\in\mathcal{M}(\boldsymbol{A})$ に対して $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Gy}$ は (3.25) をみたす．

(ii) 任意の m 次元列ベクトル $\boldsymbol{y}$ に対して $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Gy}$ は $(\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{y})'\boldsymbol{M}(\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{y})$ を最小にする．

以下では，はじめに $\{\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}\}$ を規定する条件を考える．

命題 3･5 定義 3･4 の $\{\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}\}$ は，つぎの二条件をみたす $\boldsymbol{G}\in\mathcal{R}^{n\times m}$ 全体の集合と一致する．

$$MAGA=MA \tag{3.26}$$

$$(MAG)'=MAG \tag{3.27}$$

証明　はじめに $G\in\{A_{l(M)}\}$ が，

$$(AG)'MA=MA \tag{3.28}$$

と同値であることを証明する．

$G\in\{A_{l(M)}\}$ ということは，任意の n 次元列ベクトル x および m 次元列ベクトル y に対して，つぎの不等式が成立することと同値である．

$$(AGy-y)'M(AGy-y)\leqq(Ax-y)'M(Ax-y).$$

ここで

$$x=Gy+(x-Gy)=Gy+z$$

ただし $z=x-Gy$ と書くことにより，上の条件は，

任意の m 次元列ベクトル y および n 次元列ベクトル z に対して

$$\|M^{1/2}(AG-I_m)y\|^2\leqq\|M^{1/2}(AGy+Az-y)\|^2$$
$$=\|M^{1/2}\{(AG-I_m)y+Az\}\|^2$$

が成立することと同等となり，命題 3・3 の (3.8) についての議論と同じようにして

$$M^{1/2}(AG-I_m)y\perp M^{1/2}Az$$

から

$$(AG-I_m)'MA=O_{m\times n}$$

すなわち (3.28) と同等になる．

つぎに (3.26) (3.27) の二条件をみたす $G\in\mathcal{R}^{n\times m}$ 全体の集合を $\mathcal{G}$ と書き，はじめに $\{A_{l(M)}\}\subset\mathcal{G}$ を示す．

$G\in\{A_{l(M)}\}$ のとき (3.28) が成立するから，(3.28) の右から G をかけて

$$G'A'MAG=MAG$$

すなわち

$$G'(A'MAG)=MAG \tag{3.29}$$

(3.28) を転置して出る

$$A'MAG=A'M$$

を (3.29) 左辺に代入して

$$G'A'M=MAG$$

となるから (3.27) が導かれる.

つぎに (3.28) と (3.27) とから

$$MA=G'A'MA=(MAG)'A=MAGA$$

となって (3.26) が出る.

以上で $\{A_{l(M)}\}\subset\mathcal{G}$ が示された.

逆に $G\in\mathcal{G}$ ならば,

$$MA=MAGA=(MAG)'A=(AG)'MA$$

と計算されて (3.28) が成立するから, $G\in\{A_{l(M)}\}$.

すなわち $\mathcal{G}\subset\{A_{l(M)}\}$ である. (終)

命題 3·5 の系 1 定義 3·4 の $\{A_{l(M)}^-\}$ は, つぎの二条件をみたす $G\in\mathcal{R}^{n\times m}$ 全体の集合と一致する.

$$AGA=A$$

$$(MAG)'=MAG$$

命題 3·5 の系 2 $\{A_l^-\}=A^{\{1,3\}}$

命題 3·5 の系 3 M が正値定符号の対称行列ならば,

$$\{A_{l(M^{-1})}^-\}=\{[(A')_{m(M)}^-]'\}$$

証明 所題の等式の左辺の集合は

$$AGA=A \tag{3.30}$$

$$(M^{-1}AG)'=M^{-1}AG \tag{3.31}$$

の二条件をみたす $G\in R^{n\times m}$ 全体の集合である.

(3.30) は

$$A'G'A'=A' \tag{3.32}$$

と同等である．つぎに M が正値定符号の対称行列であることから，(3.31) すなわち

$$G'A'M^{-1}=M^{-1}AG$$

は

$$MG'A'=AGM=(MG'A')' \tag{3.33}$$

と同等である．

ところで (3.32) と (3.33) の二条件をみたす $G' \in \mathcal{R}^{m\times n}$ 全体の集合は $\{(A')_{m(M)}^{-}\}$ にほかならないから証明された．　（終）

つぎの命題とその系は命題 3•4 とその系と同じような推論によって証明される．

命題 3•6　定義 3•4 の $\{A_{l(M)}^{-}\}$ は空ではない．

証明の筋道だけを記す．命題 3•5 の系 1 により，rank $A=r$ のとき前提条件 I のもとでの (3.13) の形の G について，

$$(MAG)'=MAG$$

が成立するように U, Y, Z を定めることができればよい．

それには U, Z は任意行列のままで，Y をつぎの条件によって定める．

$$(P')^{-1}MP^{-1}\begin{pmatrix} I_r & Y \\ O & O \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} I_r & O \\ Y' & O \end{pmatrix}(P')^{-1}MP^{-1}$$

ここで

$$(P')^{-1}MP^{-1}=S=\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

とおけば

$$S_{11}Y=S_{12}$$

$$S_{21}Y=Y'S_{12}$$

となるから，対称な S_{11}^{-} を使って $Y=S_{11}^{-}S_{12}$ とおけばよい．　（終）

命題 3·6 の系 定義 3·4 において $\boldsymbol{M}$ が正値定符号の対称行列の場合には，$\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}^{-}$ は一意的に定まらないにもかかわらず，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}_{l(\boldsymbol{M})}^{-}$ は一意的に定まる.

§4 一般逆行列の統計的応用

はじめに簡単な応用例を二つ記すが，その際の約束として

前提条件 II k 次元確率変数

$$\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_k \end{pmatrix} \text{ が，}\quad \text{期待値}\quad \boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_k \end{pmatrix},$$

$$\text{分散行列}\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1k} \\ \cdots & \sigma_{ij} & \cdots \\ \sigma_{k1} & \cdots & \sigma_{kk} \end{pmatrix}$$

の k 次元正規分布にしたがうとき，この分布を記号 $N_k(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ で示す. ただし rank $\boldsymbol{\Sigma}=r$ は $0\leqq r\leqq k$ をみたす整数とし，$\boldsymbol{X}$ の分布が r 次元の分布にまで退化することを許すものとする.

命題 4·1 $k(\geqq 2)$ 次元確率変数 $\boldsymbol{X}$ が正規分布 $N_k(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ にしたがうものとする. $0<k_1<k$ をみたす整数 k_1 を定めて $k_2=k-k_1$ とおき，$\boldsymbol{X}$ をはじめの k_1 個の成分から成る $\boldsymbol{X}_1=\begin{pmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_{k_1} \end{pmatrix}$ と残りの k_2 個の成分から成る $\boldsymbol{X}_2=\begin{pmatrix} X_{k_1+1} \\ \vdots \\ X_{k_1+k_2} \end{pmatrix}$ とに分割し，これに対応して

$$\boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}$$

と分割する.

このとき $\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2$ の実現値を $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$ と書けば，

(i) $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-}$ の多義性にかかわらず，

$$\boldsymbol{\mu}_{1.2}=\boldsymbol{\mu}_1+\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2) \tag{4.1}$$

は確率0の集合上を除いて一意的に定まり，さらに

$$\boldsymbol{\Sigma}_{11.22}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-\boldsymbol{\Sigma}_{21} \tag{4.2}$$

はつねに一意的に定まる．

（ii） $\boldsymbol{X}_2=\boldsymbol{x}_2$ を与えたときの $\boldsymbol{X}_1$ の条件つき分布は k_1 次元の正規分布 $N_{k_1}(\boldsymbol{\mu}_{1.2}, \boldsymbol{\Sigma}_{11.22})$ である．

証明 （i） 命題 3・4 で (3.21) を証明したのと同じようにして，$\boldsymbol{\Sigma}_{21}$ の列ベクトルはいずれも $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}_{22})$ に属することを証明できるから，適当な $\boldsymbol{C}\in\mathcal{R}^{k_2\times k_1}$ をとるとき

$$\boldsymbol{\Sigma}_{21}=\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{C}$$

が成立する．したがって

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-\boldsymbol{\Sigma}_{21}&=\boldsymbol{C}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{C}\\&=\boldsymbol{C}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{C}\end{aligned}$$

は $\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-$ の多義性にもかかわらず，つねに一意的に定まる．

なおここで

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-\boldsymbol{\Sigma}_{22}&=\boldsymbol{C}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-\boldsymbol{\Sigma}_{22}\\&=\boldsymbol{C}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}=\boldsymbol{\Sigma}_{12}\end{aligned} \tag{4.3}$$

が成立することを注意しておく．

つぎに k_2 次元確率変数 $\boldsymbol{X}_2$ について

$$\boldsymbol{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2\in\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}_{22}) \qquad a.s.$$

であるから，確率0の集合上を除けば，$\boldsymbol{x}_2$ に応じて定まる適当な k_2 次元列ベクトル $\boldsymbol{y}$ によって $\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2=\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{y}$ となり，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)&=\boldsymbol{C}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{y}\\&=\boldsymbol{C}'\boldsymbol{\Sigma}_{22}\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

は，$\boldsymbol{\Sigma}_{22}^-$ の多義性にもかかわらず一意的に定まる．

（ii） つぎに $\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{X}_1-\boldsymbol{\mu}_1\\ \boldsymbol{X}_2-\boldsymbol{\mu}_2\end{pmatrix}$ に対して線型変換を行って

$$Y=\begin{pmatrix}Y_1\\Y_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}I_{k_1} & -\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-\\O & I_{k_2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}X_1-\mu_1\\X_2-\mu_2\end{pmatrix}$$

を作れば，Y は k 次元正規分布にしたがう．

さらに (4.3) により，Y_1 と Y_2 の共分散行列は

$$\begin{aligned}Cov(Y_1, Y_2)&=(I_{k_1}, -\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-)\begin{pmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12}\\\Sigma_{21} & \Sigma_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}O\\I_{k_2}\end{pmatrix}\\&=(\Sigma_{11}-\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-\Sigma_{21}, \Sigma_{12}-\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-\Sigma_{22})\begin{pmatrix}O\\I_{k_2}\end{pmatrix}\\&=O\end{aligned}$$

となるから，Y_1 と Y_2 は独立に分布する．したがって $Y_2=X_2-\mu_2$ の値を与えたときの $Y_1=X_1-\mu_1-\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-(X_2-\mu_2)$ の条件つき分布は，条件なしの Y_1 の分布と同じになる．他方 $X_2=x_2$ の値を与えたときの X_1 の値は $Y_1+\mu_1+\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-(x_2-\mu_2)=Y_1+\mu_{1.2}$ であり，Y_1 は期待値 $\mathbf{0}$ の k_1 次元正規分布にしたがい，その分散行列は

$$\begin{aligned}Var(Y_1)&=(I_{k_1}, -\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-)\begin{pmatrix}\Sigma_{11} & \Sigma_{12}\\\Sigma_{21} & \Sigma_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}I_{k_1}\\-(\Sigma_{22}^-)'\Sigma_{21}\end{pmatrix}\\&=(\Sigma_{11}-\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-\Sigma_{21}, O)\begin{pmatrix}I_{k_1}\\-(\Sigma_{22}^-)'\Sigma_{21}\end{pmatrix}\\&=\Sigma_{11}-\Sigma_{12}\Sigma_{22}^-\Sigma_{21}=\Sigma_{11.22}\end{aligned}$$

と計算されるから，$X_2=x_2$ を与えたときの X_1 の条件つき分布は $N_{k_1}(\mu_{1.2}, \Sigma_{11.22})$ である． (終)

つぎへ進む準備のための命題を三つ述べておく．

命題 4･2 k 次元確率変数 X が $N_k(\mu, \Sigma)$ (ただし $\text{rank}\,\Sigma=r\leqq k$) にしたがい，かつ $\mu\in\mathcal{M}(\Sigma)$ ならば，

$$\text{rank}\,B=r, \qquad \Sigma=BB' \tag{4.4}$$

をみたす定数行列 $B\in\mathcal{R}^{k\times r}$ が存在して，適当な r 次元列ベクトル ρ をとるとき，つぎの二式が成立する．

$$\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{\rho} \tag{4.5}$$

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{W}+\boldsymbol{\rho}) \qquad a.s. \tag{4.6}$$

ただし $\boldsymbol{W}$ は r 次元の正規分布 $N_r(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_r)$ にしたがう確率変数とする．

証明　$\boldsymbol{\Sigma}$ は階数 r の非負値半定符号の対称行列であるから，適当な正則行列 $\boldsymbol{Q}$ によって　$\boldsymbol{Q}'\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{Q}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}$

と対角化され，

$$\boldsymbol{\Sigma}=(\boldsymbol{Q}')^{-1}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}\boldsymbol{Q}^{-1}$$

ここで，$(\boldsymbol{Q}')^{-1}$ のはじめの r 列から成る $k\times r$ 型行列を $\boldsymbol{B}$ と書けば，(4.4) が成立する．このとき前提条件から

$$\boldsymbol{\mu}\in\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma})=\mathcal{M}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}')=\mathcal{M}(\boldsymbol{B})$$

であるから，(4.5) をみたす r 次元列ベクトル $\boldsymbol{\rho}$ を定めることができる．

つぎに

$$\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}\in\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma})=\mathcal{M}(\boldsymbol{B}) \qquad a.s.$$

であるから，ある r 次元確率変数 $\boldsymbol{W}$ によって

$$\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{W} \qquad a.s. \tag{4.7}$$

となる．この両辺に対して左から $(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}'$ をかけて

$$\boldsymbol{W}=(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}'(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{\mu}) \qquad a.s. \tag{4.8}$$

この右辺は期待値 $\boldsymbol{0}$，分散行列 $(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}'\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}'\boldsymbol{B})^{-1}=\boldsymbol{I}_r$ の正規分布にしたがうから，$\boldsymbol{W}$ の分布は r 次元の標準型正規分布となり，(4.5) と (4.7) から (4.6) が導かれる．（終）

命題 4・3　r 次元確率変数 $\boldsymbol{U}$ が $N_r(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{I}_r)$ にしたがうとき，$\boldsymbol{S}$ を階数 s のベキ等な r 次の対称行列とすれば，$\boldsymbol{U}'\boldsymbol{S}\boldsymbol{U}$ は自由度 s，非心度 $\boldsymbol{\rho}'\boldsymbol{S}\boldsymbol{\rho}$ の非心カイ二乗分布にしたがう．

証明　$\boldsymbol{S}$ は適当な直交行列 $\boldsymbol{P}$ によって

$$P'SP=\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}$$

と対角化され,

$$S=P\begin{pmatrix} I_s & O \\ O & O \end{pmatrix}P'$$

が成立するから, P のはじめの s 列から成る $r\times s$ 型行列を P_1 とすれば

$$S=P_1P_1' \quad \text{かつ} \quad P_1'P_1=I_s$$

ここで s 次元確率変数 $Y=P_1'U$ を作れば, これは s 次元の正規分布にしたがい, その期待値は $P_1'\rho$, 分散行列は $P_1'P_1=I_s$ である.

したがって

$$Y'Y=U'P_1P_1'U=U'SU$$

は 自由度 s, 非心度 $(P_1'\rho)'P_1'\rho=\rho'S\rho$ の非心カイ二乗分布にしたがう.

(終)

命題 4・4 k 次元確率変数 X が $N_k(\mu, \Sigma)$ (ただし rank $\Sigma=r\leqq k$) にしたがうものとする.

(a) $\mu\in\mathcal{M}(\Sigma)$ であって, かつ

(b) 定数から成る k 次の対称行列 G が

$$\Sigma G\Sigma G\Sigma=\Sigma G\Sigma \tag{4.9}$$

をみたすとき,

$X'GX$ は自由度 trace$(G\Sigma)$, 非心度 $\mu'G\mu$ の非心カイ二乗分布にしたがう.

証明 命題 4・2 の記号を使うとき, そこで得た結果が成立している.

さらに (4.9) が成立すれば, (4.4) から

$$BB'GBB'GBB'=BB'GBB'$$

この両辺に対して, 左から $(B'B)^{-1}B'$ を, 右から $B(B'B)^{-1}$ をかけれ

ば

$$B'GBB'GB=B'GB$$

したがって $B'GB$ はべキ等な対称行列であって，

$$\begin{aligned}\operatorname{rank}(B'GB)&=\operatorname{trace}(B'GB)\\&=\operatorname{trace}(GBB')=\operatorname{trace}(G\Sigma)\end{aligned}$$

また (4.5) から　　$\rho'B'GB\rho=\mu'G\mu.$

ここで (4.6) 右辺の $W+\rho=U$ と書きかえれば

$$X'GX=U'B'GBU \quad a.s.$$

となるから，$B'GB$ を S とみて命題 4·3 を使えばよい．　　　(終)

命題 4·5　k 次元確率変数 X が $N_k(\mu,\Sigma)$（ただし $\operatorname{rank}\Sigma=r\leqq k$）にしたがい，かつ $\mu\in\mathcal{M}(\Sigma)$ とする．

(i)　対称な Σ^- によって $X'\Sigma^-X$ を作るとき，この確率変数は自由度 r，非心度 $\mu'\Sigma^-\mu$ の非心カイ二乗分布にしたがう．

このとき対称な Σ^- の多義性にかかわらず，$X'\Sigma^-X$ の値は確率0の集合上を除いて Σ^- の多義性の影響をうけることがなく，また非心度 $\mu'\Sigma^-\mu$ はつねに一意的に定まる．

(ii)　対称な $\Sigma_{[s]}{}^{(2)}$（ただし $0\leqq s\leqq r$）を定めるとき，$X'\Sigma_{[s]}{}^{(2)}X$ は自由度 s，非心度 $\mu'\Sigma_{[s]}{}^{(2)}\mu$ の非心カイ二乗分布にしたがう．

(iii)　$X'\Sigma^+X$ は自由度 r，非心度 $\mu'\Sigma^+\mu$ の非心カイ二乗分布にしたがう．

証明　命題 4·2 の証明の記号を使う．

(i)　分布については，命題 4·4 の G として Σ^- を考えればよい．以下では Σ^- の多義性についての部分を証明する．$B\in\mathcal{R}^{k\times r}$，$\operatorname{rank}B=r$ であるから，k 次の適当な正則行列 R によって

$$RB=\begin{pmatrix}I_r\\O_{(k-r)\times r}\end{pmatrix} \tag{4.10}$$

が成立する.

したがって (4.4) を考慮すると

$$RBB'R'=R\Sigma R'=\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & O \end{pmatrix}$$

が成立し, 命題 2・3 により

$$\Sigma^{\{1\}}=R'\begin{pmatrix} I_r & Y \\ U & Z \end{pmatrix}R$$

ただし U, Y, Z はそれぞれ順に $(k-r)\times r$, $r\times(k-r)$, $(k-r)\times(k-r)$ 型の任意行列となる.

$\Sigma^{\{1\}}$ のうちの対称なものを $\Sigma^{\langle 1\rangle}$ で示すことにすれば,

$$\Sigma^{\langle 1\rangle}=R'\begin{pmatrix} I_r & U' \\ U & Z \end{pmatrix}R \qquad \text{ただし } Z=Z'$$

この結果と (4.6) から

$$X'\Sigma^{\langle 1\rangle}X=(W+\rho)'B'R'\begin{pmatrix} I_r & U' \\ U & Z \end{pmatrix}RB(W+\rho) \qquad a.s.$$

ここで (4.10) を使って

$$X'\Sigma^{\langle 1\rangle}X=(W+\rho)'(W+\rho) \qquad a.s.$$

が出る.

同じようにして

$$\mu'\Sigma^{\langle 1\rangle}\mu=\rho\rho'$$

が導かれる.

(ii) $s=0$ のときはとくに論ずるに及ばない. $1\leqq s\leqq r$ として命題 2・14 に戻って考えると, そこでの A が階数 r の非負値半定符号の n 次の対称行列で, X が階数 s の対称行列ならば, (2.34) における $P_X=Q_X'$ にとることができて, $A_{[s]}{}^{\{2\}}=Z'Z$. ただし $Z\in\mathcal{R}^{s\times n}$ は $ZAZ'=I_s$ をみたす任意行列という結果を得る.

いま問題としている場合については, $\Sigma=BB'$ が階数 r の非負値半定

符号の k 次の対称行列, $\boldsymbol{\Sigma}_{[s]}{}^{(2)}$ は対称であるから,

$$\boldsymbol{\Sigma}_{[s]}{}^{(2)}=\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z} \tag{4.11}$$

ただし $\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}^{s\times k}$ は

$$\boldsymbol{Z\Sigma Z}'=\boldsymbol{ZBB}'\boldsymbol{Z}'=\boldsymbol{I}_s \tag{4.12}$$

をみたす任意行列ということになる.

そこで命題 4•4 の $\boldsymbol{G}$ として対称な $\boldsymbol{\Sigma}_{[s]}{}^{(2)}$ をとれば, その自由度は

$$\begin{aligned}\mathrm{trace}\,(\boldsymbol{\Sigma}_{[s]}{}^{(2)}\boldsymbol{\Sigma})&=\mathrm{trace}\,(\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z\Sigma})\\&=\mathrm{trace}\,(\boldsymbol{Z\Sigma Z}')=s\end{aligned}$$

と計算される. (終)

なおとくに $s=r$ の場合には命題 2•15 により $\boldsymbol{\Sigma}_{[r]}{}^{(2)}=\boldsymbol{\Sigma}^{(1,2)}$ となるから, とくに (ii) の場合を (i) と区別して論ずる必要はない.

さらに (ii) において $s<r$ の場合の非心度はつぎのように計算される.

(4.12) によれば $(\boldsymbol{ZB})\in\mathcal{R}^{s\times r}$ の s 個の行ベクトルは r 次元行ベクトルとして正規直交系になっているから, $\boldsymbol{Z}$ に依存して定まる適当な r 次元の直交行列 $\boldsymbol{S_Z}$ により,

$$\boldsymbol{ZBS_Z}=(\boldsymbol{I}_s,\ \boldsymbol{O}_{s\times(r-s)})$$

が成立する. これから

$$\boldsymbol{ZB}=(\boldsymbol{I}_s,\ \boldsymbol{O}_{s\times(r-s)})\boldsymbol{S}'_{\boldsymbol{Z}} \tag{4.13}$$

が出る.

(4.5) (4.11) (4.13) から

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{\Sigma}_{[s]}{}^{(2)}\boldsymbol{\mu}&=\boldsymbol{\rho}'\boldsymbol{B}'\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{ZB\rho}\\&=\boldsymbol{\rho}'\boldsymbol{S_Z}\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_s & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{pmatrix}\boldsymbol{S_Z}'\boldsymbol{\rho}\end{aligned} \tag{4.14}$$

が導かれて, $\boldsymbol{S_Z}'\boldsymbol{\rho}$ のはじめの s 個の成分の二乗和が非心度を与える.

(iii) 命題 4•4 の $\boldsymbol{G}$ として $\boldsymbol{\Sigma}^{+}$ を考えればよい. (終)

例 4·1　$k=4$ 次元確率変数 $\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}X_1\\X_2\\X_3\\X_4\end{pmatrix}$ が期待値 $\boldsymbol{\mu}=\begin{pmatrix}\mu_1\\\mu_2\\\mu_3\\\mu_4\end{pmatrix}$,

$$\text{分散行列}\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{pmatrix}1&1&2&1\\1&2&3&\frac{3}{2}\\2&3&5&\frac{5}{2}\\1&\frac{3}{2}&\frac{5}{2}&\frac{5}{4}\end{pmatrix}$$

の 4 次元正規分布にしたがい，$\boldsymbol{\mu}\in\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma})$ とする．

rank $\boldsymbol{\Sigma}=2$ であって，命題 4·2 の

$$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}1&0\\1&1\\2&1\\1&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

ここで $\boldsymbol{X}_1=\begin{pmatrix}X_1\\X_2\end{pmatrix}$, $\boldsymbol{X}_2=\begin{pmatrix}X_3\\X_4\end{pmatrix}$ と分割すれば，

$$\boldsymbol{\Sigma}_{22}=\begin{pmatrix}5&\frac{5}{2}\\\frac{5}{2}&\frac{5}{4}\end{pmatrix}$$

であるから，

$$\boldsymbol{\Sigma}_{22}{}^{\{1\}}=\frac{1}{5\sqrt{5}}\begin{pmatrix}4&5\\2&-10\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&u\\u&z\end{pmatrix}\frac{1}{5\sqrt{5}}\begin{pmatrix}4&2\\5&-10\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{125}\begin{pmatrix}16+40u+25z&8-30u-50z\\8-30u-50z&4-40u+100z\end{pmatrix}$$

ただし u, z は任意定数と計算される．

命題 4·1 の (4.2) は

$$\boldsymbol{\Sigma}_{11.22}=\boldsymbol{\Sigma}_{11}-\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}{}^{\{1\}}\boldsymbol{\Sigma}_{21}$$

$$=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 2\end{pmatrix}-\frac{1}{5}\begin{pmatrix}4 & 6\\ 6 & 9\end{pmatrix}=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}{}^{\{1\}}=\frac{1}{25}\begin{pmatrix}8+10u & 4-20u\\ 12+15u & 6-30u\end{pmatrix}$$

となるが，$\boldsymbol{X}_2$ の実現値を $\boldsymbol{x}_2$，$E(\boldsymbol{X}_2)=\boldsymbol{\mu}_2$ とおくとき，確率0の集合上を除いて，

$$\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2\in\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}_{22})=\mathcal{M}(\boldsymbol{B})=\mathcal{M}\left(\begin{pmatrix}2\\ 1\end{pmatrix}\right)$$

であるから，$\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}{}^{\{1\}}(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{\mu}_2)$ から任意定数 u が消える．

例 4・2　上の例 4・1 の $\boldsymbol{B}$ に対して (4.10) を成立させる $\boldsymbol{R}$ は

$$\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ -1 & 1 & 0 & 0\\ -1 & -1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1\end{pmatrix}$$

したがってこの $\boldsymbol{R}$ を使って

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\{1\}}=\boldsymbol{R}'\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_2 & \boldsymbol{Y}\\ \boldsymbol{U} & \boldsymbol{Z}\end{pmatrix}\boldsymbol{R}$$

ただし $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}$ はいずれも 2×2 型の任意行列とする．

ここで $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{U}'$，$\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{Z}'$ にとれば $\boldsymbol{\Sigma}^{\langle1\rangle}$ を得る．

とくに $\boldsymbol{\Sigma}^{\langle1\rangle}$ の一つとして

$$\boldsymbol{\Sigma}^{+}=\frac{1}{196}\begin{pmatrix}277 & -241 & 36 & 18\\ -241 & 221 & -20 & -10\\ 36 & -20 & 16 & 8\\ 18 & -10 & 8 & 4\end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{\Sigma}_{[1]}{}^{\{2\}}$ の計算はつぎのようになる．

$\boldsymbol{Z}\in\mathcal{R}^{1\times4}$ を $\boldsymbol{Z}=(z_1, z_2, z_3, z_4)$ と書き，$\boldsymbol{ZB}=(a_1, a_2)$ とすれば，(4.12) の条件 $a_1{}^2+a_2{}^2=1$ をみたす (a_1, a_2) を定めて

$$(z_1, z_2, z_3, z_4)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}=(a_1, a_2)$$

を解くと，z_3, z_4 を任意定数として

$$\boldsymbol{Z}=\left(a_1-a_2-z_3-\frac{1}{2}z_4,\ a_2-z_3-\frac{1}{2}z_4,\ z_3,\ z_4\right).$$

そこで (4.11) によりこの $\boldsymbol{Z}$ によって

$$\boldsymbol{\Sigma}_{[1]}{}^{\{2\}}=\boldsymbol{Z}'\boldsymbol{Z}$$

ただし z_3, z_4 は任意，a_1, a_2 は $a_1{}^2+a_2{}^2=1$ をみたす任意定数とする．

$$\boldsymbol{S}_z=\begin{pmatrix} a_1 & -a_2 \\ a_2 & a_1 \end{pmatrix}$$

であるから，$\boldsymbol{\rho}=\begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \end{pmatrix}$ と書くとき (4.14) から命題 4.5 (ii)の非心度は $(a_1\rho_1+a_2\rho_2)^2$ となる．

これ以降は回帰模型への一般逆行列の応用について述べるが，そのためにつぎの条件をおく．

前提条件 III n 次元確率変数 $\boldsymbol{Y}=\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}$ について，つぎのことを前提する．

（a） $\boldsymbol{Y}$ の期待値は $\qquad E(\boldsymbol{Y})=\boldsymbol{X\beta} \qquad$ (4.15)

$\boldsymbol{Y}$ の分散行列は $\qquad \boldsymbol{Var}(\boldsymbol{Y})=\sigma^2\boldsymbol{\Sigma} \qquad$ (4.16)

（b） $\boldsymbol{X}\in\mathcal{R}^{n\times k}$ は既知定数行列で，$n\geqq k$，rank $\boldsymbol{X}=r\leqq k$.

（c） $\boldsymbol{\beta}$ は k 次元の未知母数列ベクトルで，k 次元ユークリッド空間内の任意の値をとり得る．

（d） $\sigma^2>0$ は未知母数で，$\boldsymbol{\Sigma}$ は既知定数から成る正値定符号の n 次の対称行列.

良く知られているように $\boldsymbol{\Sigma}$ が既知で正値定符号であるために回帰模型の取扱いが簡単になる.

はじめに使われる概念について復習すると

定義 4·1　前提条件 III のもとで,

（i）k 次元の既知定数行ベクトル $\boldsymbol{l} \in \mathcal{L}(\boldsymbol{X})$ のとき, $\boldsymbol{l\beta}$ を推定可能関数という.

（ii）既知定数行列 $\boldsymbol{L} \in \mathcal{R}^{l \times k}$ について $\mathcal{L}(\boldsymbol{L}) \subset \mathcal{L}(\boldsymbol{X})$ のとき, $\boldsymbol{L\beta}$ を l 次元の推定可能ベクトル関数という.

とくに rank $\boldsymbol{L}=l$ のとき, $\boldsymbol{L\beta}$ の l 個の推定可能関数は独立であるという.

命題 4·6　l 次元の推定可能ベクトル関数 $\boldsymbol{L\beta}$ が与えられたとき, 適当な定数行列 $\boldsymbol{C} \in \mathcal{R}^{l \times n}$ と l 次元の定数列ベクトル $\boldsymbol{b}$ によって

$$E(\boldsymbol{CY}+\boldsymbol{b})=\boldsymbol{L\beta} \tag{4.17}$$

が成立する.

逆にある定数行列 $\boldsymbol{C} \in \mathcal{R}^{l \times n}$ と l 次元の定数列ベクトル $\boldsymbol{b}$ を定めるとき, (4.17)の関係が任意の $\boldsymbol{\beta}$ に対して成立するならば, (4.17) 右辺の $\boldsymbol{L\beta}$ は推定可能ベクトル関数である.

証明　$\boldsymbol{L\beta}$ が推定可能ベクトル関数ならば, $\mathcal{L}(\boldsymbol{L}) \subset \mathcal{L}(\boldsymbol{X})$ であるから, 適当な $\boldsymbol{C} \in \mathcal{R}^{l \times n}$ によって

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{CX} \tag{4.18}$$

が成立する. したがって $\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$ にとれば (4.15) によって

$$E(\boldsymbol{CY}+\boldsymbol{b})=\boldsymbol{C}E(\boldsymbol{Y})=\boldsymbol{CX\beta}=\boldsymbol{L\beta}.$$

逆にある $\boldsymbol{C}$ と $\boldsymbol{b}$ について (4.17) が成立すれば, (4.15) により

$$\boldsymbol{CX\beta}+\boldsymbol{b}=\boldsymbol{L\beta}.$$

ここで $\boldsymbol{\beta}$ は任意の k 次元列ベクトルでよいから

$$\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}, \qquad \boldsymbol{CX}=\boldsymbol{L}$$

となって $\mathscr{L}(\boldsymbol{L})\subset\mathscr{L}(\boldsymbol{X})$.

すなわち $\boldsymbol{L\beta}$ は推定可能ベクトル関数である. (終)

命題 4・6 の系 前提条件 III のもとで $\boldsymbol{\beta}$ の任意の成分が推定可能となるための必要十分条件は rank $\boldsymbol{X}=k$ である.

定義 4・2 l 次元の推定可能ベクトル関数 $\boldsymbol{L\beta}$ が与えられている. ある $\boldsymbol{B}_0\in\boldsymbol{R}^{l\times n}$ を定めるとき,

(i) $E(\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{Y})=\boldsymbol{L\beta}$ であって, かつ

(ii)
$$E(\boldsymbol{BY})=\boldsymbol{L\beta} \tag{4.19}$$

をみたす任意の $\boldsymbol{B}\in\mathscr{R}^{l\times n}$ に対して

$$\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{BY})-\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{Y})$$

が非負値半定符号の対称行列のとき, $\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{Y}$ を $\boldsymbol{L\beta}$ の最良線型不偏推定子とよぶ.

ここでつぎの注意を述べておく.

命題 4・6 の証明でみたように, (4.19) は

$$\boldsymbol{BX}=\boldsymbol{L}$$

と同義であるから, ある $\boldsymbol{B}_0\in\mathscr{R}^{l\times n}$ を定めるとき, 任意の l 次元列ベクトル $\boldsymbol{a}$ に対して

(i) $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{X}=\boldsymbol{a}'\boldsymbol{L}$ であって, かつ

(ii)
$$\boldsymbol{a}'\boldsymbol{BX}=\boldsymbol{a}'\boldsymbol{L} \tag{4.20}$$

をみたす任意の $\boldsymbol{B}\in\mathscr{R}^{l\times n}$ について

$$\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{BY})\geqq\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{Y}) \tag{4.21}$$

が成立する場合に, $\boldsymbol{B}_0\boldsymbol{Y}$ を $\boldsymbol{L\beta}$ の最良線型不偏推定子とよぶことになる.

命題 4・7 前提条件 III のもとで, ある定数行列 $\boldsymbol{A}\in\mathscr{R}^{k\times n}$ を定めて $\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{AY}$ を作る.

任意の正整数 l を与えたとき, $\mathscr{L}(\boldsymbol{L})\subset\mathscr{L}(\boldsymbol{X})$ をみたす任意の $\boldsymbol{L}\in\mathscr{R}^{l\times k}$ に対して $\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ が $\boldsymbol{L\beta}$ の最良線型不偏推定子となるための必要十分条件は,

任意の l 次元行ベクトル $\boldsymbol{l}\in\mathcal{L}(X)$ に対して $\boldsymbol{l}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ が $\boldsymbol{l}\boldsymbol{\beta}$ の線型最良不偏推定子となることである.

証明　必要性は明か. 十分性のうち不偏性は簡単で, 任意の $\boldsymbol{l}\in\mathcal{L}(X)$ に対して $E(\boldsymbol{l}\hat{\boldsymbol{\beta}})=\boldsymbol{l}\boldsymbol{\beta}$ であるから, 与えられた $\boldsymbol{L\beta}$ に対して $E(\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}})=\boldsymbol{L\beta}$.

最良性の証明には上述の注意を使う. 任意の l 次元列ベクトル $\boldsymbol{a}$ を定め, $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{L}=\boldsymbol{l}$ とおく. $\boldsymbol{l}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{a}'\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{a}'\boldsymbol{LAY}$ が $\boldsymbol{l\beta}=\boldsymbol{a}'\boldsymbol{L\beta}$ の線型不偏推定子として分散が最小という前提であるから, 定義 4・2 の $\boldsymbol{L}$ として $\boldsymbol{l}$ を, $\boldsymbol{B}$ として $\boldsymbol{b}\in\mathcal{R}^{1\times n}$ を考えると, つぎの結果が成立している.

$$\left.\begin{array}{l}\boldsymbol{bX}=\boldsymbol{l}\ \text{をみたすような任意の}\ \boldsymbol{b}\in\mathcal{R}^{1\times n}\\ \text{に対して}\ \boldsymbol{Var}(\boldsymbol{bY})\geqq\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{LAY})\end{array}\right\}\qquad(4.22)$$

ところで (4.20) をみたす任意の $\boldsymbol{B}\in\mathcal{R}^{l\times n}$ については $(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{B})\boldsymbol{X}=\boldsymbol{a}'\boldsymbol{L}=\boldsymbol{l}$ が成立しているから (4.22) の $\boldsymbol{b}$ として $\boldsymbol{a}'\boldsymbol{B}$ を使うことができて, $\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{BY})\geqq\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{a}'\boldsymbol{LAY})$ が導かれ, さきの記号の $\boldsymbol{B}_0$ に相当するものが $\boldsymbol{LA}$ であることに注意すれば, $\boldsymbol{LAY}=\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ が $\boldsymbol{L\beta}$ の最良線型不偏推定子となる.　(終)

つぎに進む前に準備として

命題 4・8　前提条件 III のもとで

(i)
$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X})^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}\qquad(4.23)$$

(ii)　$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X})^{-}\boldsymbol{X}'$ は一般逆行列 $(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X})^{-}$ の多義性の影響を受けることなく定まる対称行列である.

証明　(i)　$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}$ とおけば, 命題 2・11 (i) により

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X})^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}$$

ここで $(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2})^{-1}$ (rank $\boldsymbol{\Sigma}=n$ から $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$ は正則行列) を左からかけて (4.23) を得る.

(ii)　いまの記号で

$$A(A'A)^{-}A'=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}X(X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}X)^{-}X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \qquad (4.24)$$

は $\mathcal{M}(A)=\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}X)$ 上への正射影行列として $(X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}X)^{-}$ の多義性の影響を受けない対称行列である．そして定義 3•1 で述べたようにある対称行列 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$ を決めて考えているから (ii) の結果を得る．　　(終)

つぎの命題は古典的である．

命題 4•9　前提条件 III のもとで，確率変数 Y の実現値を $\boldsymbol{y}$ と記す．

(i)　$\boldsymbol{y}$ が与えられたとき，$(\boldsymbol{y}-X\boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-X\boldsymbol{\beta})$ の最小値を与える $\boldsymbol{\beta}$ を $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ と書けば，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は方程式

$$X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}X\boldsymbol{\beta}=X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y} \qquad (4.25)$$

の解である．

$r=k$ の場合には $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ が一意的に定まるが，$r<k$ の場合には $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は一意的には定まらない．

(ii)　任意の推定可能ベクトル関数 $L\boldsymbol{\beta}$ について，その最良線型不偏推定子は $L\hat{\boldsymbol{\beta}}$ によって与えられ，$L\hat{\boldsymbol{\beta}}$ はつねに一意的に定まる．

(iii)
$$Var(L\hat{\boldsymbol{\beta}})=\sigma^2L(X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}X)^{-}L'$$

であって，この値は $(X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}X)^{-}$ の多義性にかかわらず一意的である．

(iv)　$n>r$ のとき

$$SSR=(\boldsymbol{y}-X\hat{\boldsymbol{\beta}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-X\hat{\boldsymbol{\beta}}) \qquad (4.26)$$

$$\hat{\sigma}^2=SSR/(n-r)$$

とおけば，$\hat{\sigma}^2$ は σ^2 の不偏推定子である．

証明　(i)　(4.25) は $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ をウエイトとする加重最小二乗法の正規方程式である．

$\boldsymbol{\Sigma}$ が正値定符号の対称行列であるから

$$\mathcal{M}(X')=\mathcal{M}(X'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}X)$$

が成立し，$\boldsymbol{\beta}$ についての方程式 (4.25) は可解であって，

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X} \tag{4.27}$$

とおくとき，命題 3·1 によりその一般解は

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y}+(\boldsymbol{I}_k-\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{M})\boldsymbol{z} \tag{4.28}$$

となる．ここに $\boldsymbol{z}$ は k 次元の任意の列ベクトルである．

$r=k$ の場合には rank $(\boldsymbol{M})=k$. したがって $\boldsymbol{M}^{-}=\boldsymbol{M}^{-1}$ となるから，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y}$$

として一意的に定まるが，$r<k$ の場合には (4.28) の $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は一意的ではない．

(ii) および (iii)　命題 4·6 により，$\boldsymbol{L}\in\mathcal{R}^{l\times k}$ のとき

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}$$

をみたす $\boldsymbol{C}\in\mathcal{R}^{l\times n}$ が存在する．(4.28) から

$$\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{I}_k-\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{M})\boldsymbol{z}$$

命題 4·8 (i) によって上の式の右辺第2項が消え，同命題 (ii) によって第1項は $\boldsymbol{M}^{-}$ の多義性にかかわらず一意的に定まる．

$$\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y} \tag{4.29}$$

の期待値をとり，(4.15) と命題 4·8 (i) を使えば

$$E(\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}})=\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{\beta}$$

同じような推論によって

$$\begin{aligned}Var(\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}})&=\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}Var(\boldsymbol{Y})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{C}'\\&=\sigma^2\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{C}'=\sigma^2\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{L}'\end{aligned} \tag{4.30}$$

が導かれ，$\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{L}'$ は $\boldsymbol{M}^{-}$ の多義性の影響を受けない．

なお (4.30) の変形に際して $\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{M}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'=\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'$ を使うが，この式は命題 4·8 (i) から出る．

つぎに $\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の最良性を証明する．命題 4·7 により，任意の l 次元行ベクトル $\boldsymbol{l}\in L(\boldsymbol{X})$ に対して $\boldsymbol{l}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の最良性を示せばよい．すなわち $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{c}\boldsymbol{X}$

をみたす任意の n 次元行ベクトル $\boldsymbol{c}$ について

$$\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{cY})-\boldsymbol{Var}(\boldsymbol{l}\hat{\boldsymbol{\beta}})\geqq 0 \tag{4.31}$$

を示せばよい.

(4.30) で $l=1$ の場合の結果を使えば,

$$\begin{aligned}(4.31)\text{ の左辺}&=\sigma^2\boldsymbol{c\Sigma c}'-\sigma^2\boldsymbol{cXM^-X'c'}\\&=\sigma^2\boldsymbol{cQQ'c'}=\sigma^2\|\boldsymbol{cQ}\|^2\geqq 0\end{aligned}$$

ただし $$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1/2}$$

となって求める結果が得られる.

(iv) まず

$$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X\beta} \tag{4.32}$$

の実現値を

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\beta} \tag{4.33}$$

と書くとき

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{u}&=(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{y}\\&\quad-(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{X\beta}\\&=(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

が成立するから, (4.29) の $\boldsymbol{L}$ を $\boldsymbol{X}$ と書きかえた式を使って

$$\begin{aligned}SSR&=(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})\\&=\|\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{y}\|^2\\&=\|\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{u}\|^2\\&=\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}-\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{u}\end{aligned} \tag{4.34}$$

これは

$$\begin{aligned}&\mathrm{trace}\,\{\boldsymbol{u}'(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}-\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{u}\}\\&\quad=\mathrm{trace}\,\{(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}-\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{uu}'\}\end{aligned}$$

に等しいことに注目し, $\boldsymbol{u}$ を $\boldsymbol{U}$ と書きかえて期待値をとれば

$$E(SSR)=\mathrm{trace}\,\{(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}-\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})E(\boldsymbol{UU}')\}$$

$$=\sigma^2 \mathrm{trace}\{(\boldsymbol{\Sigma}^{-1}-\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1})\boldsymbol{\Sigma}\}$$
$$=\sigma^2(n-r)$$

を得る．ここで $\mathrm{rank}(\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{M})=\mathrm{rank}\,\boldsymbol{M}=\mathrm{rank}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})=\mathrm{r}$ を使った．

なお $n=r$ の場合には，$n\geqq k\geqq r$ から $n=k=r$ となり，$\boldsymbol{X}$ は n 次の正則な行列となるために，(4.25) は

$$\boldsymbol{X\beta}=\boldsymbol{y}$$

と同等になり，$\hat{\boldsymbol{\beta}}=\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{y}$，$SSR=0$ となる．　　　　　　　　　　　　(終)

以上の古典的な結果のうち (i) (ii) を Rao-Mitra 流に説明すると，つぎのようになる．

命題　4･10　前提条件 III のもとで，確率変数 $\boldsymbol{Y}$ の実現値を $\boldsymbol{y}$ と記す．

(i)　任意の推定可能ベクトル関数 $\boldsymbol{L\beta}$ について，その最良線型不偏推定子は

$$\boldsymbol{L}[(\boldsymbol{X}')_{m(\Sigma)}{}^{-}]'\boldsymbol{y}=\boldsymbol{L}[\boldsymbol{X}_{l(\Sigma^{-1})}{}^{-}]\boldsymbol{y}$$

として与えられ，

(ii)　$$\hat{\boldsymbol{\beta}}=[(\boldsymbol{X}')_{m(\Sigma)}{}^{-}]'\boldsymbol{y}=[\boldsymbol{X}_{l(\Sigma^{-1})}{}^{-}]\boldsymbol{y}$$

と書けば，$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ は

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X\beta}=\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{y} \tag{4.25}$$

の解にほかならない．

証明　まず命題 3･5 の系 3 から

$$[(\boldsymbol{X}')_{m(\Sigma)}{}^{-}]'=\boldsymbol{X}_{l(\Sigma^{-1})}{}^{-}$$

であることを注意しておく．

(i)　命題 4･7 により，任意の $\boldsymbol{l}\in\mathcal{L}(\boldsymbol{X})$ に対して $\boldsymbol{l\beta}$ の最良線型不偏推定子が

$$\boldsymbol{l}[(\boldsymbol{X}')_{m(\Sigma)}{}^{-}]'\boldsymbol{y}$$

であることを示せばよい．

定義 4･2 によれば，任意に $\boldsymbol{l}\in\mathcal{L}(\boldsymbol{X})$ が与えられたとき，

$$l=bX \tag{4.35}$$

をみたすような n 次元行ベクトル b について

$$Var(by)=b'\Sigma b$$

を最小にする b を b_0 と書くとき，b_0y が $l\beta$ の最良線型不偏推定子である．

(4.35) は

$$X'b'=l'$$

と同等であり，$l'\in\mathcal{M}(X')$ は任意でよいから，最小 Σ セミノルム一般逆行列についての定義 3·2 から，求める b_0' は

$$b_0'=(X')_{m(\Sigma)}^{-}l'$$

となる．これから $b_0y=l[(X')_{m(\Sigma)}^{-}]'y$ を得る．

(ii) $\hat{\beta}=[X_{l(\Sigma^{-1})}^{-}]y$ は，任意の n 次元列ベクトル y に対して $X\beta=y$ についての Σ^{-1} セミ最小二乗解であるから，その定義 3·4 により，与えられた任意の y に対して $(X\beta-y)'\Sigma^{-1}(X\beta-y)$ の最小値を与える．したがって上の $\hat{\beta}$ は (4.25) をみたす．（終）

命題 4·9 および 4·10 の幾何学的説明を与えておく．

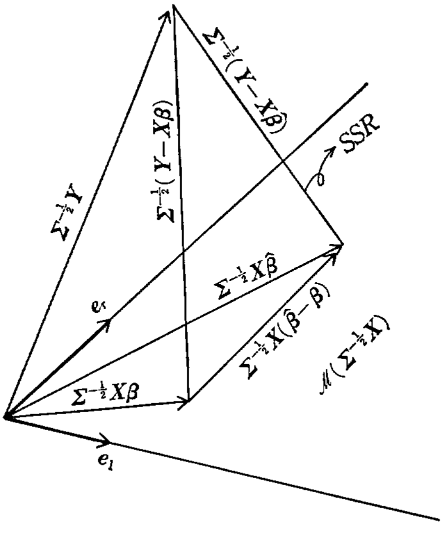
第2図では r 次元の部分ベクトル空間 $\mathcal{M}(\Sigma^{-1/2}X)$ の基底を $(e_1, e_2, \cdots, e_r)$ とするとき，$r=2$ の場合についての平面 $\mathcal{M}(\Sigma^{-1/2}X)$ が二つのベクトル e_1, e_r によって張られている．$\Sigma^{-1/2}y$ を $\mathcal{M}(\Sigma^{-1/2}X)$ 上に正射影した結果は

$$\begin{aligned}\Sigma^{-1/2}X(X'\Sigma^{-1/2}\Sigma^{-1/2}X)^{-}X'\Sigma^{-1/2}\Sigma^{-1/2}y&=\Sigma^{-1/2}XM^{-}X'\Sigma^{-1}y\\&=\Sigma^{-1/2}X\hat{\beta}\end{aligned}$$

であって，これは

$$\begin{aligned}(y-X\beta)'\Sigma^{-1}(y-X\beta)&=\|\Sigma^{-1/2}(y-X\beta)\|^2\\&=\|\Sigma^{-1/2}y-\Sigma^{-1/2}X\beta\|^2\end{aligned}$$

第2図



の最小値を与えており，この最小値が $SSR=(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})$ となる．

$E(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{Y})=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X\beta}$ は当然 $\mathscr{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ 上のベクトルであって，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{y}$ と $E(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{Y})$ との差を $\mathscr{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ 上に正射影したものが $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$ となる．

つぎに述べる正規模型では，三つのベクトル $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{y}$, $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X\beta}$, $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ の端点で作られる直角三角形が，カイ二乗変量の分解をあらわすことになる．

最後に回帰分析の正規模型について述べる．

前提条件 IV　前提条件 III に加えて

$$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X\beta} \tag{4.32}$$

が n 次元正規分布にしたがうとき，これを回帰分析の正規模型という．

このとき n 次元確率変数 $\boldsymbol{U}$ の分布は

$$N_n(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{\Sigma}) \qquad (\text{ただし } \operatorname{rank} \boldsymbol{\Sigma}=r\leqq k)$$

となる.

命題 4・11 前提条件 IV のもとで, l 次元の推定可能ベクトル関数 $\boldsymbol{L\beta}$ の最良線型不偏推定子を $\boldsymbol{L\hat{\beta}}$ とするとき,

(i) $\boldsymbol{L}(\boldsymbol{\hat{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$ は l 次元正規分布 $N_l(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{LM^-L'})$ にしたがい,

(ii) SSR/σ^2 は自由度 $n-r$ のカイ二乗分布にしたがい,

(iii) これら二つの変量は独立に分布する.

ただし

$$SSR=(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\hat{\beta}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X\hat{\beta}}) \tag{4.26}$$

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{X'\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X} \tag{4.27}$$

とする. また自由度 0 のカイ二乗分布は定数 0 を意味するものとする.

証明 まず (4.29) と (4.32) から

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L\hat{\beta}}&=\boldsymbol{CXM^-X'\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{X\beta}+\boldsymbol{U})\\&=\boldsymbol{CX\beta}+\boldsymbol{CXM^-X'\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U}\\&=\boldsymbol{L\beta}+\boldsymbol{CXM^-X'\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U}\end{aligned}$$

であるから

$$\boldsymbol{L}(\boldsymbol{\hat{\beta}}-\boldsymbol{\beta})=\boldsymbol{CXM^-X'\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U} \tag{4.36}$$

が出る.

つぎに (4.34) と同じようにして

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X\hat{\beta}})=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{XM^-X'\Sigma}^{-1})\boldsymbol{U} \tag{4.37}$$

が導かれる.

そこで

$$\boldsymbol{Z}=\frac{1}{\sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}$$

とおけば, $\boldsymbol{Z}$ は n 次元の標準型正規分布 $N_n(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_n)$ にしたがい, (4.36) (4.37) からつぎの等式が成立する.

$$\frac{1}{\sigma}\begin{pmatrix} \boldsymbol{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta}) \\ \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{B} \end{pmatrix}\boldsymbol{Z} \tag{4.38}$$

ただし

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$$

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$$

(4.38) と命題 4•8（i）から出る

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}'=0$$

のゆえに

$\frac{1}{\sigma}\boldsymbol{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$ は l 次元正規分布 $N_l(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}')$ にしたがい，

$\frac{1}{\sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})$ は n 次元正規分布 $N_n(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}')$ にしたがい，かつ

これら二つの変量は独立に分布する.

ここで命題 4•8 (i) (ii) を使えば，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^{-}\boldsymbol{L}'$$

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}'=\boldsymbol{B}$$

であることは容易に確かめられる.

$\boldsymbol{B}$ は $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})^{\perp}$ 上への正射影行列であり，$\boldsymbol{B}^{+}=\boldsymbol{I}_n$, $\operatorname{rank}\boldsymbol{B}=n-r$ さらに $\boldsymbol{0}\in\mathcal{M}(\boldsymbol{B})$ は明かだから，命題 4•5 (iii) により

$$\frac{1}{\sigma^2}(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})=\frac{1}{\sigma^2}SSR$$

が自由度 $n-r$ のカイ二乗分布にしたがうことになる.　　　　　　　　（終）

命題 4•12　前提条件 IV のもとで，$\boldsymbol{L}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\theta}$ を与えられた l 次元の推定可能ベクトル関数とし，その最良線型不偏推定子を $\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\hat{\boldsymbol{\theta}}$ とする.

$n>r$, $\operatorname{rank}\boldsymbol{L}=s\geqq 1$ のとき，与えられた l 次元列ベクトル $\boldsymbol{\theta}_0\in\mathcal{M}(\boldsymbol{L})$ について，帰無仮説 $H_0:\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_0$ を対立仮説 $H_1:\boldsymbol{\theta}\neq\boldsymbol{\theta}_0$ に対して検定する問題を考える.

$$SSR=(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \tag{4.26}$$

$$M=X'\Sigma^{-1}X' \tag{4.27}$$

$$Q=(\hat{\theta}-\theta_0)'(LM^-L')^-(\hat{\theta}-\theta_0) \tag{4.39}$$

ただし $(LM^-L)^-$ は対称な一般逆行列とする.

以上の前提条件のもとで，つぎの結果が成立する.

(i)
$$F=\frac{Q}{SSR}\cdot\frac{n-r}{s}$$

を検定統計量として，$0<\alpha<1$ をみたす定数 α に対して

$F\geqq F_\alpha(s,n-r)$ ならば H_0 を棄却し,

$F<F_\alpha(s,n-r)$ ならば H_0 を採択すれば,

これはサイズ α の検定である.

ただし $F_\alpha(s,n-r)$ は自由度 $(s,n-r)$ のエフ分布における上側 $100\cdot\alpha$ パーセント・ポイントとする.

(ii) 検定統計量 F は，帰無仮説 H_0 の真偽にかかわらず，自由度 $(s,n-r)$，非心度 $\frac{1}{\sigma^2}(\theta-\theta_0)'(LM^-L)^-(\theta-\theta_0)$ の非心エフ分布にしたがう.

証明 $\theta_0\in\mathcal{M}(L)$ であるから，$L\beta_0=\theta_0$ をみたす k 次元列ベクトル β_0 が存在する.

$$Q=(\hat{\beta}-\beta_0)'L'(LM^-L')^-L(\hat{\beta}-\beta_0)$$

は明か.

命題 4・11 の証明でみたように，$\frac{1}{\sigma}L(\hat{\beta}-\beta)$ は l 次元正規分布 $N_l(0,LM^-L')$ にしたがい，$\frac{1}{\sigma^2}SSR$ とは独立に分布する．それゆえ $\frac{1}{\sigma}L(\hat{\beta}-\beta_0)$ は l 次元正規分布 $N_l\left(\frac{1}{\sigma}L(\beta-\beta_0),\ LM^-L'\right)$ にしたがう．ここで $\mathrm{rank}\,(LM^-L')=s$ が証明されれば，$\mathrm{rank}\,L=s$ のゆえに

$$\frac{1}{\sigma}L(\beta-\beta_0)\in\mathcal{M}(LM^-L') \quad \text{が導かれ,}$$

命題 4·5（i）により，$\frac{1}{\sigma^2}Q$ は自由度 s，非心度

$$\frac{1}{\sigma^2}(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\beta}_0)'\boldsymbol{L}'(\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{L}')^-\boldsymbol{L}(\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{\beta}_0)=\frac{1}{\sigma^2}(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}_0)'(\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{L}')^-(\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{\theta}_0)$$

の非心エフ分布にしたがい，上記のように $\frac{1}{\sigma^2}SSR$ とは独立に分布する．

したがって，あとは rank $(\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{L}')=s$ を示せばよい．

$$\mathscr{L}(\boldsymbol{L})\subset\mathscr{L}(\boldsymbol{X})=\mathscr{L}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$$

であるから，rank $\boldsymbol{L}=s\leqq$ rank $\boldsymbol{X}=r$ であり

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X} \tag{4.40}$$

をみたす $\boldsymbol{F}\in\mathscr{R}^{l\times n}$，rank $\boldsymbol{F}=s$ が存在する．

(4.40) から，$\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$ (4.41)

が導かれるが，(4.41) 右辺の項のうち $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{X}'\boldsymbol{M}^{-1/2}$ が $\mathscr{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ 上への正射影行列であることに注目すれば，(4.41) の行列を $\boldsymbol{K}$ とおくとき，

$$\mathscr{M}(\boldsymbol{K})=\{\boldsymbol{K}\boldsymbol{u}:\boldsymbol{u}\in\mathscr{V}_n\}=\{\boldsymbol{F}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}\boldsymbol{t}:\boldsymbol{t}\in\mathscr{V}_k\}$$
$$=\{\boldsymbol{L}\boldsymbol{t}:\boldsymbol{t}\in\mathscr{V}_k\}=\mathscr{M}(\boldsymbol{L})$$

から rank $\boldsymbol{K}=$rank $\boldsymbol{L}=$s が出て，

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'=\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2})'=\boldsymbol{L}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{L}'$$

の階数も s となる．　　　　（終）

命題 4·13　命題 4·12 の前提条件と記号を使い，さらに $\boldsymbol{L}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\theta}_0\in\mathscr{M}(\boldsymbol{L})$ という条件のもとでの $(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})$ の最小値を $\widetilde{SSR}$ と書くことにする．

このとき，条件 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\theta}_0$ が成立するならば，(4.39) の Q について，$Q=\widetilde{SSR}-SSR$ という等式が成立する．

証明　二段に分けて証明する．

（i）$\boldsymbol{L}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\theta}_0\in\mathscr{M}(\boldsymbol{L})$ の条件のもとで $(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})$ の最小

値を与える $\boldsymbol{\beta}$ を $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ と書けば,

$$\widetilde{SSR}=(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}}) \tag{4.42}$$

である. はじめに,

$$\boldsymbol{N}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{I}_k-\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L}) \tag{4.43}$$

とおくとき, 確率変数としての $\widetilde{SSR}$ について, 等式

$$\widetilde{SSR}=\|\{\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{N}(\boldsymbol{N}'\boldsymbol{N})^-\boldsymbol{N}'\}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}\|^2 \tag{4.44}$$

が成立することを証明する.

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\theta}_0$$

の一般解は, 命題 3·1 から

$$\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{\theta}_0+(\boldsymbol{I}_k-\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L})\boldsymbol{z} \tag{4.45}$$

ただし $\boldsymbol{z}$ は k 次元の任意の列ベクトルである.

したがって

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})&=\|\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}-\boldsymbol{y})\|^2\\&=\|\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\{\boldsymbol{X}(\boldsymbol{I}_k-\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L})\boldsymbol{z}-(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{\theta}_0)\}\|^2\end{aligned}$$

において,

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{T}&=\boldsymbol{I}_k-\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L}\\\boldsymbol{c}&=\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{\theta}_0\end{aligned}\right\} \tag{4.46}$$

と書きかえれば

$$(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})=(\boldsymbol{X}\boldsymbol{T}\boldsymbol{z}-\boldsymbol{c})'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{T}\boldsymbol{z}-\boldsymbol{c}).$$

これを最小にするような $\boldsymbol{z}$ の値 $\tilde{\boldsymbol{z}}$ は, 最小二乗法の正規方程式

$$\boldsymbol{T}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{T}\boldsymbol{z}=\boldsymbol{T}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{c}$$

を解くことによって与えられる.

$$\boldsymbol{T}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{T}=\boldsymbol{N}'\boldsymbol{N}$$

に注目すれば,

$$\tilde{\boldsymbol{z}}=(\boldsymbol{N}'\boldsymbol{N})^-\boldsymbol{N}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{c}+\{\boldsymbol{I}_k-(\boldsymbol{N}'\boldsymbol{N})^-\boldsymbol{N}'\boldsymbol{N}\}\boldsymbol{w}.$$

ただし $\boldsymbol{w}$ は k 次元の任意の列ベクトル.

これを (4.45) 右辺の $\boldsymbol{z}$ に代入した値を $\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ とし，$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X\beta}+\boldsymbol{u}$ と (4.46) 第2式を使って $\boldsymbol{X}\tilde{\boldsymbol{\beta}}$ を変形すれば，(4.42) 右辺から (4.44) 右辺が導かれる．

(ii) つぎに

$$\widetilde{SSR}-SSR=(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{L}'(\boldsymbol{LM}^-\boldsymbol{L}')^-\boldsymbol{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta}) \tag{4.47}$$

を証明する．そのためにつぎの点に注目する．

(4.44) は $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}$ の $\mathcal{M}(\boldsymbol{N})^\perp=\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XT})^\perp$ 上への正射影の長さの二乗が $\widetilde{SSR}$ であることを示している．

他方，命題 4·9 の証明でみたように

$$SSR=\|(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XM}^-\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2})\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}\|^2$$

であるから，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}$ の $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})^\perp$ 上への正射影の長さの二乗が SSR である．

さらに $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}$ の $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ 上への正射影は $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$ であり，かつ $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XT})\subset\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ であるから，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$ の $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XT})^\perp=\mathcal{M}(\boldsymbol{N})^\perp$ 上への正射影の長さの二乗が (4.47) 右辺の形であらわされることを証明すればよいことになる．

(4.46) 第1式から $\boldsymbol{I}_k=\boldsymbol{T}+\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L}$ が出るから，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})&=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{T}+\boldsymbol{L}^-\boldsymbol{L})(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\\&=\boldsymbol{N}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})+\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XL}^-\boldsymbol{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})\end{aligned}$$

となり，これの $\mathcal{M}(\boldsymbol{N})^\perp$ 上への正射影は

$$\{\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{N}(\boldsymbol{N}'\boldsymbol{N})^-\boldsymbol{N}'\}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XL}^-\boldsymbol{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})$$

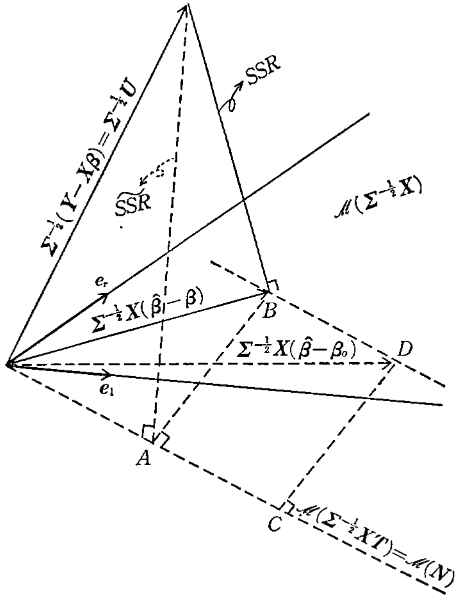
である．

したがって証明すべきことがらは

$$(\boldsymbol{L}^-)'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\{\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{N}(\boldsymbol{N}'\boldsymbol{N})^-\boldsymbol{N}'\}\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XL}^-=(\boldsymbol{LM}^-\boldsymbol{L}')^- \tag{4.48}$$

であるが，(4.48) 左辺を $\boldsymbol{S}$ とするとき，(4.43) から出る $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XL}^-\boldsymbol{L}=\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X}-\boldsymbol{N}$ を使って

第3図



$$\boldsymbol{LM^{-}L'SLM^{-}L'=LM^{-}L'}$$

が成立することを直接計算によって確かめることができるから，(4.47)が示された．

最後に $\hat{\boldsymbol{\theta}}=\boldsymbol{L}\hat{\boldsymbol{\beta}}$ であったから $\boldsymbol{L\beta}=\boldsymbol{\theta}_0$ という条件が成立すれば，(4.39)(4.47) から

$$Q=\widetilde{SSR}-SSR$$

が導かれる． (終)

命題 4·12, 4·13 を幾何学的に示したものが第3図である．さきと同じく $\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_r$ によって張られる部分空間が $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ であり，原点を通る点線は $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ に含まれる部分空間 $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{XT})=\mathcal{M}(\boldsymbol{N})$ を示す．$\mathcal{M}(\boldsymbol{N})$ は $\boldsymbol{L\beta}=\boldsymbol{0}$ をみたす $\boldsymbol{\beta}$ によって $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X\beta}$ とあらわされるよ

うな部分空間である.

この図で $\boldsymbol{L\beta}=\boldsymbol{\theta}_0=\boldsymbol{L\beta}_0$ をみたす $\boldsymbol{\beta}$ によって $\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X\beta}$ とあらわされるベクトルの端点は, $\mathcal{M}(\boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{X})$ 上の2点 B, D を通る直線上にある. したがって $\boldsymbol{L\beta}=\boldsymbol{\theta}_0$ という条件のもとでは, 第3図の線分 $\overline{AB}$ の長さの二乗を示す (4.47) の $\widetilde{SSR}-SSR$ と, 線分 $\overline{CD}$ の長さの二乗を示す

$$Q=(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta}_0)'\boldsymbol{L}'(\boldsymbol{LM}^-\boldsymbol{L}')^-\boldsymbol{L}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta}_0)$$

とが等しくなる.

つぎの二つは前提条件 Ⅳ のもとでの命題 4•12 の検定の例である.

例 4•3 (1元配置分散分散)

第 i 組第 j 番目 $(i=1,2,\cdots,k\,;\,j=1,2,\cdots,n_i)$ (ただし $k\geqq 2$, $\sum_{i=1}^{k}n_i=n>k$) の観測値 y_{ij} に対応する確率変数を Y_{ij} とする. n 個の Y_{ij} がすべて独立で, Y_{ij} $(j=1,2,\cdots,n_i)$ が1次元正規分布 $N_1(\mu_i,\sigma^2)$ ($\sigma^2>0$ は未知母数) にしたがうとき,

$$\begin{pmatrix} Y_{11}\\ \vdots\\ Y_{1n_1}\\ \vdots\\ Y_{k1}\\ \vdots\\ Y_{kn_k}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{1}_{n_1} & & 0\\ & \boldsymbol{1}_{n_2} & \\ 0 & & \ddots\quad \boldsymbol{1}_{n_k}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mu_1\\ \mu_2\\ \vdots\\ \mu_k\end{pmatrix}+\begin{pmatrix} U_{11}\\ \vdots\\ U_{1n_1}\\ \vdots\\ U_{k1}\\ \vdots\\ U_{kn_k}\end{pmatrix}$$

であるから,

$$\underset{n\times 1}{\boldsymbol{y}}=\begin{pmatrix} y_{11}\\ \vdots\\ y_{1n_1}\\ \vdots\\ y_{k1}\\ \vdots\\ y_{kn_k}\end{pmatrix},\qquad \underset{n\times k}{\boldsymbol{X}}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{1}_{n_1} & & 0\\ & \boldsymbol{1}_{n_2} & \\ 0 & & \ddots\quad \boldsymbol{1}_{n_k}\end{pmatrix},\qquad \mathrm{rank}\,\boldsymbol{X}=k,\qquad \underset{k\times 1}{\boldsymbol{\beta}}=\begin{pmatrix}\mu_1\\ \mu_2\\ \vdots\\ \mu_k\end{pmatrix},$$

$\underset{n\times n}{\boldsymbol{\Sigma}}=\boldsymbol{I}_n$ であって,

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}n_1 & & 0\\ & n_2 & \\ 0 & & \ddots\quad n_k\end{pmatrix}$$

$$M^{-1}=\begin{pmatrix} \frac{1}{n_1} & & & 0 \\ & \frac{1}{n_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \frac{1}{n_k} \end{pmatrix}$$

$$\bar{y}_i=\frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i} y_{ij} \quad (i=1, 2, \cdots, k)$$

$$\bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k} n_i\bar{y}_i$$

とおけば，

$$\hat{\beta}=\begin{pmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \vdots \\ \bar{y}_k \end{pmatrix}$$

さらにすべての成分が1から成る k 次の正方行列を $\boldsymbol{E}$ と書き

$$\underset{k\times k}{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{I}_k-\frac{1}{n}\boldsymbol{EM} \quad \text{とすれば} \quad \text{rank } \boldsymbol{L}=k-1$$

$$\boldsymbol{L\beta}=\begin{pmatrix} \mu_1-\mu \\ \mu_2-\mu \\ \vdots \\ \mu_k-\mu \end{pmatrix} \qquad \text{ただし} \quad \mu=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k} n_i\mu_i$$

$$\boldsymbol{L\beta}=\begin{pmatrix} \bar{y}_1-\bar{y} \\ \bar{y}_2-\bar{y} \\ \vdots \\ \bar{y}_k-\bar{y} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{H}_0 : \boldsymbol{L\beta}=\boldsymbol{0} \Leftrightarrow \mu_1=\mu_2=\cdots=\mu_k$$

を検定するには，

$$\boldsymbol{LM}^{-1}\boldsymbol{L}'=\boldsymbol{M}^{-1}-\frac{1}{n}\boldsymbol{E}$$

$$(\boldsymbol{LM}^{-1}\boldsymbol{L}')^{+}=\boldsymbol{M}$$

$$Q=\sum_{i=1}^{k} n_i(\bar{y}_i-\bar{y})^2$$

$$SSR=\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}(y_{ij}-\bar{y})^2$$

$$F=\frac{Q}{SSR}\frac{n-k}{k-1}$$

を $F_\alpha(k-1, n-k)$ と対比すればよい．

推定可能関数として

$\boldsymbol{l}=(1,-1,0\cdots\cdots0)$，rank $\boldsymbol{l}=1$ から $\boldsymbol{l}\beta=\mu_1-\mu_2$ を作れば

$$\boldsymbol{l}\hat{\boldsymbol{\beta}}=\bar{y}_1-\bar{y}_2$$

$$\boldsymbol{l}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{l}'=\frac{1}{n_1}+\frac{1}{n_2}$$

$$(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})'\boldsymbol{l}'(\boldsymbol{l}\boldsymbol{M}^-\boldsymbol{l}')^-\boldsymbol{l}(\hat{\boldsymbol{\beta}}-\boldsymbol{\beta})=\frac{\{(\bar{y}_1-\bar{y}_2)-(\mu_1-\mu_2)\}^2}{\dfrac{1}{n_1}+\dfrac{1}{n_2}}$$

となるから

$$\frac{\{(\bar{y}_1-\bar{y}_2)-(\mu_1-\mu_2)\}^2\Big/\left(\dfrac{1}{n_1}+\dfrac{1}{n_2}\right)}{SSR/(n-k)}$$

が自由度 $(1, n-k)$ のエフ分布にしたがうことになる．

例 4・4　(幾組かの回帰直線の方向係数の相等性の検定)

$k\geqq 2$ 組の資料について回帰直線を計算する．第 i $(i=1,2,\cdots,k)$ 組の資料を (x_{ij}, y_{ij}) $(j=1,2,\cdots,n_i)$（ただし $n_i\geqq 3$）とし，定数項以外の説明変数ベクトルを $x_i=\begin{pmatrix}x_{i1}\\x_{i2}\\\vdots\\x_{in_i}\end{pmatrix}$ として y_{ij} に対応する確率変数 Y_{ij} は，1次元の正規分布 $N_1(\alpha_i+\gamma_i x_{ij}, \sigma^2)$ $(\sigma^2>0$ は未知母数) にしたがい，$n=\sum_{i=1}^{k}n_i$ 個の Y_{ij} はすべて独立とする．さらに $i=1,2,\cdots,k$ に対して

$$\bar{x}_i=\frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i}x_{ij},\qquad \bar{y}_i=\frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i}y_{ij}$$

$$\bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k}n_i\bar{x}_i,\qquad \bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k}n_i\bar{y}_i$$

と書くとき，

$$v_i=\sum_{j=1}^{n_i}(x_{ij}-\bar{x}_i)^2>0$$

とする．

また，$\quad v=\sum_{i=1}^{k}v_i$

$$\hat{\alpha}_i=\bar{y}_i-\hat{\gamma}_i\bar{x}_i,\qquad \hat{\gamma}_i=\sum_{j=1}^{n_i}(x_{ij}-\bar{x}_i)(y_{ij}-\bar{y}_i)/v_i$$

$$\gamma=\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{k}v_i\gamma_i,\qquad \hat{\gamma}=\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{k}v_i\hat{\gamma}_i$$

とおき，すべての成分が1から成る k 次の正方行列を $\boldsymbol{E}$, $v_1, v_2, \cdots, v_k$ を対角元にもつ対角行列を $\boldsymbol{V}$ とする．

このとき

$$\underset{n\times 2k}{\boldsymbol{X}}=\left(\begin{array}{cccc:cccc}\boldsymbol{1}_{n_1} & & & 0 & \boldsymbol{x}_1 & & & 0\\ & \boldsymbol{1}_{n_2} & & & & \boldsymbol{x}_2 & & \\ & & \ddots & & & & \ddots & \\ 0 & & & \boldsymbol{1}_{n_k} & 0 & & & \boldsymbol{x}_k\end{array}\right)$$

$$\text{rank}\,\boldsymbol{X}=2k$$

$$\boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \vdots\\ \alpha_k\\ \gamma_1\\ \vdots\\ \gamma_k\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{I}_n$$

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{X}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{X}=\left(\begin{array}{ccc:ccc}n_1 & & 0 & n_1\bar{x}_1 & & 0\\ & \ddots & & & \ddots & \\ 0 & & n_k & 0 & & n_k\bar{x}_k\\ \hdashline n_1\bar{x}_1 & & 0 & \sum_{j=1}^{n_1}x_{1j}^2 & & 0\\ & \ddots & & & \ddots & \\ 0 & & n_k\bar{x}_k & 0 & & \sum_{j=1}^{n_k}x_{kj}^2\end{array}\right)$$

$$
\boldsymbol{M}^{-1}=\left(\begin{array}{cc|cc}
\dfrac{\sum_j x_{1j}^2}{n_1v_1} & 0 & -\dfrac{\bar{x}_1}{v_1} & 0 \\
 & \ddots & & \ddots \\
0 & \dfrac{\sum_j x_{kj}^2}{n_kv_k} & 0 & -\dfrac{\bar{x}_k}{v_k} \\
\hline
-\dfrac{\bar{x}_1}{v_1} & 0 & \dfrac{1}{v_1} & 0 \\
 & \ddots & & \ddots \\
0 & -\dfrac{\bar{x}_k}{v_k} & 0 & \dfrac{1}{v_k}
\end{array}\right)
$$

$$
\boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix}\hat{\alpha}_1\\ \vdots \\ \hat{\alpha}_k \\ \hat{\gamma}_1 \\ \vdots \\ \hat{\gamma}_k\end{pmatrix}
$$

ここで　$\underset{k\times 2k}{\boldsymbol{L}}=\left(\boldsymbol{O}_{k\times k}\ \vdots\ \boldsymbol{I}_k-\dfrac{1}{v}\boldsymbol{EV}\right)$　とおけば，

$$\text{rank } \boldsymbol{L}=k-1$$

$$
\boldsymbol{L\beta}=\begin{pmatrix}\gamma_1-\gamma\\ \vdots \\ \gamma_k-\gamma\end{pmatrix},\qquad \boldsymbol{L\hat{\beta}}=\begin{pmatrix}\hat{\gamma}_1-\hat{\gamma}\\ \vdots \\ \hat{\gamma}_k-\hat{\gamma}\end{pmatrix}
$$

$$H_0:\boldsymbol{L\beta}=\boldsymbol{0}\Leftrightarrow \gamma_1=\gamma_2=\cdots=\gamma_k$$

を検定するには，

$$\boldsymbol{LM}^{-1}\boldsymbol{L}'=\boldsymbol{V}^{-1}-\frac{1}{v}\boldsymbol{E}$$

$$(\boldsymbol{LM}^{-1}\boldsymbol{L}')^{+}=\boldsymbol{V}$$

$$Q=\sum_{i=1}^{k}v_i(\hat{\gamma}_i-\hat{\gamma})^2$$

$$SSR=\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}(y_{ij}-\hat{\alpha}_i-\hat{\gamma}_i x_{ij})^2$$

から

$$F=\frac{Q}{SSR}\cdot\frac{n-2k}{k-1}$$

を作り，$F_{\alpha}(k-1, n-2k)$ と対比すればよい．

参考文献

§2 の前提条件 I のもとで命題 2・3～2・7 を導くことについては，1978 年の第 46 回日本統計学会で報告したが，命題 2・3 および 2・4 は，すでに Pringle & Rayner [4] に述べられており，命題 2・5 以下が筆者の得た結果である．

命題 2・9～2・13 の射影行列についての結果は，Rao の研究によって広く知られている．

命題 2・14 は Ben-Israel & Greville [1] に報告されているが，本論で述べた導き方は筆者の工夫である．

§2 の例 2・2 は Mitra [3] p. 475 の数値例を，第1図は Kuhnert [2] S. 20 の図を借りた．

§3 は Mitra [3], Rao [5], Rao & Mitra [6] によっているが，命題 3・4, 3・6 の証明は筆者による．

§4 は Rao [5] に沿うて，その結果を解説する形になっているが，命題 4・4, 4・5 などについての Rao との異同は読者にはおのずから明かであろう．最後の回帰模型の説明では本論のように射影行列を明示的な形で述べた方が理解しやすいと思われる．

なお一般逆行列を主題とするものではないが，統計への射影行列の応用を説明したものとして，佐和 [7] と竹内・柳井 [8] をあげておく．

[1] Ben-Israel, Adi & Greville, Thomas N. E. (1974). *Generalized Inverses: Theory and Applications*. Wiley, New York.

[2] Kuhnert, Frieder (1976). *Pseudoinverse Matrizen und die Methode der Regularisierung*. Teubner, Leipzig.

[3] Mitra, Sujit Kumar (1980). Generalized Inverse of Matrices and Applications to Linear Models. *Handbook of Statistics* (ed. by P. R. Krishnaiah) *Vol. 1. Analysis of Variance*. North-Holland, Amsterdam. pp. 471-512.

[4] Pringle, R. M. & Rayner, A. A. (1971). *Generalized Inverse Matrices with Applications to Statistics.* (*Griffin's Statistical Monographs & Courses, No. 28*) Griffin, London.

[5] Rao, C. Radhakrishna (1973). *Linear Statistical Inference and its Applications. 2nd ed.*, Wiley, New York.

邦訳　ラオ著，奥野忠一・長田洋・篠崎信雄・広崎昭太・古河陽子・矢島敬二・鷲尾泰俊訳 (1977)『統計的推測とその応用』東京図書株式会社，東京.

[6] Rao, C. Radhakrishna & Mitra, Sujit Kumar (1971). *Generalized Inverse of Matrices and its Applications.* Wiley, New York.

邦訳　ラオ＝ミトラ著，渋谷政昭・田辺国士訳 (1973)『一般逆行列とその応用』東京図書株式会社，東京.

[7] 佐和隆光 (1979).『回帰分析』朝倉書店，東京.

[8] 竹内啓・柳井晴夫 (1972).『多変量解析の基礎――線型空間への射影による方法』東洋経済新報社，東京.

(昭和 56 年 9 月 16 日　受理)

付記. 校正中下記の書物を入手したので，注目すべき文献として追加しておく.

Campell, S. L. & Meyer, Jr., C. D. (1979). *Generalized Inverses of Linear Transformations.* Pitman, London.