

Mathematica による記号演算と統計モデルの開発

前川真一

東京工業大学 大学院社会理工学研究科

1. はじめに

統計モデルの開発は、1) モデルの理論的研究、2) データとの適合度基準を最適にするようなパラメタの推定法の研究、3) パラメタの標準誤差の推定法の研究、4) パラメタ推定のプログラムの作成、5) モデルの評価実験、6) 成果の公表、等の段階を踏んで行われる。そして、第1段階から第3段階までは、計算機を利用することなく行われるのが常であり、第4段階になって初めて計算機が用いられる。その理由としては、第3段階までは主に記号としての数式処理が求められているからに他ならない。しかし、モデル開発の初期の段階においても、計算機を利用することが可能であれば、より効率の良いモデル開発が可能となることが期待される。

数式処理を中心としたモデル開発に計算機を利用する際には、以下のことに注意しなければならない。すなわち、統計モデルにおいては、同一種類の複数のパラメタを、添字付き変数として取り扱い、それらをまとめてベクトルや行列として表現することが多いため、データとの適合度の指標として用いられる尤度関数や最小2乗基準は、総和記号演算子を用いた添字付き変数の関数として、もしくはスカラー値をとる行列の関数として表現される。したがって、初期段階において利用される数式処理言語は、添字付き変数や、行列を記号的に取り扱えなくてはならない。また、ベイズ統計モデルの開発に際しては、統計分布の密度関数の核の部分の同定能力が必要となる。

本研究においては、数式処理を得意とする計算機言語 Mathematica を用いて、第1段階から第3段階においても計算機を用いる可能性を検討するが、Mathematica は、記号としての添字付き変数を含む総和記号演算や行列の取り扱いが苦手である。したがって、これらの演算を可能とする Mathematica のパッケージを作成することにより、Mathematica の持つ数学知識データベースとしての機能をフルに活用しながら、添字付き変数や行列を含む統計モデルを開発することが可能となる。

2. Mathematica で出来ること、出来ないこと

Mathematica は要素が定義された行列（それを本稿では、Semi-Symbolic な行列と呼ぶ）の演算（和、差、積、逆行列、固有値・固有ベクトル、転置、要素による微分等）を記号的に行うことが出来る。しかし、要素が未定義な行列（Full-Symbolic な行列と呼ぶ）の演算は取り扱えない。また、総和記号演算において、添字の上限として用いられる変数が未定義の場合には、総和記号を含む式の単純化や、添字付き変数に関する微分を行うことが出来ない。また、統計分布に関しては、その同定機能を持たない。

3. SuMOpack

筆者は現在、添字付き変数や行列を記号的に扱える Mathematica のパッケージとして、SuMopack (Summation and Matrix Operation package for Mathematica 5.1) を企画・開発中である。本稿では、その概要を述べる。

3.1 行列演算

Mathematica が取り扱える通常の積 (Dot) に加えて、Hadamard 積 (CircleDot, matHTimes) と Kronecker 積 (CircleTimes, matKTimes) や t, vec, diag, Diagonal, vecdiag, ginv, tr, ssq 等の関数を準備し、それらを用いた演算を可能とした。

3.1.1 行列表記の単純化 (matSimplify, matDistTransp, matCancelTransp, etc)

```
In[536]:= t[inv[A]].inv[t[t[B + X]]].inv[A.inv[A]].t[A.t[X + B]]
% // matSimplify
% // matTranspInv // matCancelInv
```

Out[536]= $A^{-1T} \cdot (B + X)^{TT^{-1}} \cdot (A \cdot A^{-1})^{-1} \cdot (A \cdot (B + X)^T)^T$

Out[537]= $A^{-1T} \cdot A^T$

Out[538]= Identity

```
In[539]:= D.inv[A + B.C.D].B // matSimpInv12
% // matSimpInvR12
```

Out[539]= $C^{-1} - C^{-1} \cdot (D \cdot A^{-1} \cdot B + C^{-1})^{-1} \cdot C^{-1}$

Out[540]= $D \cdot (A + B \cdot C \cdot D)^{-1} \cdot B$

3.1.2 行列要素の総和記号による表示 (matToSum)

```
In[541]:= exp3 = A.(B + C).t[D].diag[inv[Z]]
exp31 = matToSum[exp3]
```

Out[541]= $A \cdot (B + C) \cdot D^T \cdot \text{diag}(Z^{-1})$

Out[542]= $(Z^{-1})_{j,j} \left(\sum_{s2=1}^{nr(B)} A_{i,s2} \sum_{s3=1}^{nc(D)} B_{s2,s3} D_{j,s3} + \sum_{s2=1}^{nr(C)} A_{i,s2} \sum_{s3=1}^{nc(D)} C_{s2,s3} D_{j,s3} \right)$

3.1.3 スカラー関数の行列による微分 (mD)

(Hadamard 積、diag、要素の冪乗を含む行列表現のトレース、固有値、行列式の微分)

```
In[555]:= exp = ssq[Y - X.A.t[B]]
mD[exp, A]
mD[exp, B]
```

Out[555]= $\text{Tr}[Y^T \cdot Y] + \text{Tr}[-B \cdot A^T \cdot X^T \cdot Y] + \text{Tr}[-Y^T \cdot X \cdot A \cdot B^T] + \text{Tr}[B \cdot A^T \cdot X^T \cdot X \cdot A \cdot B^T]$

Out[556]= $(X^T \cdot (X \cdot A \cdot B^T - 2Y) + (B \cdot A^T \cdot X^T \cdot X)^T) \cdot B$

Out[557]= $(2B \cdot (X \cdot A)^T - 2Y^T) \cdot X \cdot A$

3.1.4 分割行列の計算 (matSweep etc)

```
In[561]:= bigA = matSet[A, 2, 2, sym, 1]
matTimes[t[bigA], bigA]
```

$$\text{Out[561]} = \begin{pmatrix} (A_{1,1}) & (A_{2,1}) \\ (A_{2,1}) & (A_{2,2}) \end{pmatrix}$$

$$\text{Out[562]} = \begin{pmatrix} (A_{1,1}^T \cdot A_{1,1} + A_{2,1}^T \cdot A_{2,1}) & (A_{1,1}^T \cdot A_{2,1} + A_{2,1}^T \cdot A_{2,2}) \\ (A_{2,1}^T \cdot A_{1,1} + A_{2,2}^T \cdot A_{2,1}) & (A_{2,1}^T \cdot A_{2,1} + A_{2,2}^T \cdot A_{2,2}) \end{pmatrix}$$

```
In[600]:= matSweep[bigA]
```

$$\text{Out[600]} = \begin{pmatrix} (A_{1,1}^{-1} \cdot A_{2,1} \cdot (A_{2,2} - A_{2,1} \cdot A_{1,1}^{-1} \cdot A_{2,1})^{-1} \cdot A_{2,1} \cdot A_{1,1}^{-1} + A_{1,1}^{-1}) & (-A_{1,1}^{-1} \cdot A_{2,1} \cdot (A_{2,2} - A_{2,1} \cdot A_{1,1}^{-1} \cdot A_{2,1})^{-1}) \\ -(A_{2,2} - A_{2,1} \cdot A_{1,1}^{-1} \cdot A_{2,1})^{-1} \cdot A_{2,1} \cdot A_{1,1}^{-1} & (A_{2,2} - A_{2,1} \cdot A_{1,1}^{-1} \cdot A_{2,1})^{-1} \end{pmatrix}$$

```
In[617]:= bigAinv = matSweep[bigA];
bigAAinv = matTimes[bigA, bigAinv] // matSimplify;
bigAAinv[[1, 1]]
bigAAinv[[1, 2]]
```

Out[619]= (Identity)

Out[620]= (0)

3.2 総和記号演算

添字付き変数を含む総和記号演算子に関しては、その単純化と微分、ならびに、対応する行列表現を求める関数等が用意されている。

3.2.1 総和記号演算の単純化 (sumSimplify, sumCollect, sumDistribute, etc)

```
In[153]:= exp = Sum[Sum[(ai + bj) ci,j, {j, 1, m}], {i, 1, n}]
% // sumArgExpand
% // sumDistribute
% // sumSimplify
% // sumMoveOut
```

$$\text{Out[153]} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (a_i + b_j) c_{i,j}$$

$$\text{Out[154]} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (a_i c_{i,j} + b_j c_{i,j})$$

$$\text{Out[155]} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_i c_{i,j} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m b_j c_{i,j}$$

$$\text{Out[156]} = \sum_{j=1}^m b_j \sum_{i=1}^n c_{i,j} + \sum_{i=1}^n a_i \sum_{j=1}^m c_{i,j}$$

$$\text{Out[157]} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_i c_{i,j} + \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n b_j c_{i,j}$$

3.2.2 総和記号による表示の行列化 (sumToMat)

```

ln[579]= (inv[Z])j,j  $\left( \sum_{s2=1}^{nr[B]} A_{i,s2} \sum_{s3=1}^{nc[D]} B_{s2,s3} D_{j,s3} + \sum_{s2=1}^{nr[C]} A_{i,s2} \sum_{s3=1}^{nc[D]} C_{s2,s3} D_{j,s3} \right) // \text{sumToMat}$ 
% // matCollect
Out[579]= (A.B.DT.diag(Z-1) + A.C.DT.diag(Z-1))i,j
Out[580]= (A.(B + C).DT.diag(Z-1))i,j

```

3.2.3 総和記号を含む関数の添字付き変数による微分 (sD)

```

ln[621]=  $\pi_j = \frac{g[\sum_{k=1}^q x_{j,k} \beta_k]}{\sum_{i=1}^n g[\sum_{k=1}^q x_{i,k} \beta_k]}$  ;
exp =  $\sum_{j=1}^m f_j \text{Log}[\pi_j]$ 
d1 = sD[exp, beta]
Out[622]=  $\sum_{j=1}^m \log\left(\frac{g(\sum_{k=1}^q \beta_k x_{j,k})}{\sum_{i=1}^n g(\sum_{k=1}^q \beta_k x_{i,k})}\right) f_j$ 
Out[623]=  $\left(\sum_{i=1}^n g\left(\sum_{s=1}^q \beta_{s\$} x_{i,s\$}\right)\right) \sum_{j=1}^m \frac{f_j \left(\frac{x_{j,z} g'(\sum_{s=1}^q \beta_{s\$} x_{j,s\$})}{\sum_{i=1}^n g(\sum_{s=1}^q \beta_{s\$} x_{i,s\$})} - \frac{g(\sum_{s=1}^q \beta_{s\$} x_{j,s\$}) \sum_{i=1}^n x_{i,z} g'(\sum_{s=1}^q \beta_{s\$} x_{i,s\$})}{(\sum_{i=1}^n g(\sum_{s=1}^q \beta_{s\$} x_{i,s\$}))^2}\right)}{g(\sum_{s=1}^q \beta_{s\$} x_{j,s\$})}$ 

```

4. Mathematica による結果の検証

先に述べたように、Mathematica は Semi-Symbolic な行列を取り扱うことが出来る。したがって、SuMOPack による Full-Symbolic な演算の結果を、そこに含まれる行列の要素を記号的に定義したのち Mathematica を用いて同等の演算を行うことにより、検証することが出来る。総和記号演算の結果も、総和記号のインデックスの上限を指定することにより、同様に Mathematica を用いて検証することが出来る。

5. BayesPack・StatPack

関数と変数名を与えられたときに、その関数が、どのような統計的分布の密度関数の核と見なせるかを調べるためのプログラムである。たとえば、関数として尤度関数と事前分布の積を渡すと、事後分布を同定してくれる。

6. 結論

SuMOPack ならびに BayesPack・StatPack は未だ開発中であるが、これまでのところ、Mathematica の数学知識データベースを利用することにより、今までは紙と鉛筆を用いて行わなければならなかった作業のかなりの部分を、計算機を用いて行えることが判明した。また、統計教育においても、特に行列演算や、総和記号、添字付き変数の取り扱いに関して、その有効性は大きいと考えられる。

参考文献

Harville,D.A. (1997) *Matrix Algebra from a Statistician's Perspective*. Springer-Verlag, New York, Inc
 前川真一 (2005) スカラー値をとる行列の関数の微分の表現について。(未刊行)