

「特集 計算推論—モデリング・数理・アルゴリズム—」 について

土谷 隆[†] (オーガナイザー)

本号の特集テーマは「計算推論 モデリング・数理・アルゴリズム」である。本特集では計算推論を「自然現象や社会現象をデータに基づいて適切に理解し予測するために計算機を用いて行われる帰納的あるいは演繹的推論,そしてそのための手法や技術の総称」と考える。そして,計算機による推論を前提としたモデリング,推論のためのアルゴリズム,それらに関連する数理,これらを計算推論の主要な 3 要素と捉える。重心の位置はさまざまであるにせよ,これら 3 つの分野の交差点に立つのが計算推論にかかわる研究者である。本特集は,モデリング・数理・アルゴリズムに関連する 13 編の論文から構成される。以下,簡単にその内容を紹介してみたい。

サポートベクターマシンに代表されるカーネル法や粒子フィルタは,計算推論におけるモデリングの新しい枠組みの代表例である。本特集では 3 本の論文がこれらの話題を扱っている。

福水論文「正定値カーネルによる回帰問題における次元削減法」では,統計的情報処理における基本的問題である回帰問題における次元削減について,条件付独立性と再生核ヒルベルト空間を用いた新しい接近法について論じている。次元削減問題を条件付独立性の立場から定式化し,条件付独立性を再生核ヒルベルト空間上の共分散作用素を用いて特徴付け,カーネル法を用いて問題を有限次元に落とし,この特徴付けに基づいて部分空間を適切に最適化することで有効な次元削減が実現できることを実例を通して検証している。

サポートベクターマシンは判別のための標準的道具立てとしてもはや定着した感があるが,多値判別や確率的な判別については現在もさまざまな接近法の研究が試みられている。松井・田邊論文「dPLRM を用いた話者識別」では,田邊により新しく開発された,確率的な多値判別を可能とする識別機械 dPLRM(dual Penalized Logistic Regression Machine)とその話者識別への応用が紹介されている。カーネル法やロジスティック多値判別とも深く関係するこの枠組みを用いることで,データに ad hoc な前処理を施すことなく高精度の話者識別が可能であることが示されている。

近年の計算機性能の劇的な向上は,偏微分方程式モデルをデータに合わせるという数理科学者にとっての一つの夢をいよいよ実現の射程に捉えつつある。この分野はデータ同化と呼ばれる。データ同化は統計学にとっても新しい挑戦的な研究テーマである。中村・上野・樋口論文「データ同化:その概念と計算アルゴリズム」においては,この 10 年余りの間,積極的に研究が展開されてきた粒子フィルタと気象学・海洋学において提案され用いられてきたデータ同化のための基本的アルゴリズムの一つであるアンサンブルカルマンフィルタの関連について議論し,数値実験などにより両者を比較している。

次に実際問題のモデリングを扱った 4 編の論文を紹介する。

看護師勤務のスケジューリングは医療現場における重要な問題である。池上論文「ナース・スケジューリング 調査・モデル化・アルゴリズム」は著者による現場調査,そしてそれに基

[†] 統計数理研究所: 〒106-8569 東京都港区南麻布 4-6-7

づく問題のモデリングからアルゴリズム開発,そして現実のスケジューリング問題を妥協せずに解ききるまでの問題解決の全過程を紹介している.得られたモデルとアルゴリズムは他のスタッフスケジューリングにも適用可能である.調査・モデル化・アルゴリズム全てを基本的に一人の研究者が手がけたという珍しい研究例である.早期のシステム実用化が待たれる.

藤崎・田邊論文「販売年別廃車ハザードモデルに基づく乗用車の年次需要予測」では乗用車の需要予測の問題を取り扱っている.需要の大きな部分を買替え需要が占めることに着目し,廃車台数の予測を通じて需要予測を行う.廃車台数を予測するために販売年別の車が車齢を経るにつれて廃車されていく過程をハザード関数がロジスティック関数に従うロジスティックハザード分布によって推定し,それを元に精度の良い予測モデルが得られることを検証している.1996年の車検改正の影響,廃車過程がバブル期を挟んでどのように変化していくか等についても検討されている.

上田・牧野・伊藤論文「ヌジ人名史料による家系図の作成について」は,古代メソポタミアのヌジ遺跡から出土した粘土板に記された個人名のデータから家系図を計算機によって復元し,考古学的な観点から考察したものである.その結果として従来知られていなかったと思われる家系図が得られる.得られた家系図の集合を元にして確率モデルによる古代社会の人口推定を行うことなども視野に入れており,計算推論による新しい視点からの考古学の可能性を示唆する研究である.

土谷・笹川論文「2次錐計画問題による磁気シールドのロバスト最適化」では,リニアモーターカーの磁気シールド最適設計問題を数千変数の2次錐計画問題に定式化し,著者らが開発した主双対内点法を用いて解いている.ロバスト性を向上させるために,一旦最適設計されたシールドの形状を,確率的に擾動した設計問題を1万回解いて変形を繰返して改良し,最終的に得られたシールドのロバスト性能を最尤法で推定している.最適化技術の進展により新たに可能となった計算推論の一例である.

なお,藤崎・田邊論文と上田・牧野・伊藤論文は,特集とは独立に当初原著論文として統計数理に投稿されていたものを,特集の趣旨に鑑みて著者の了解を得て組み入れさせていただいたものである.

最適化や数値計算,データ操作のためのアルゴリズムは計算推論を支える基礎技術である.これらの計算アルゴリズムが発展することにより,新しいモデルの実用化やまったく新しい視点からの推論が可能となる.以下の4編の論文は,アルゴリズムに関するものである.

計算推論は必ずしもモデリングを通じてのみ行われるものではない.巨大なデータベースからの共通のパターンやルールを探索するための効率的アルゴリズムは計算推論の研究の重要な側面の一つである.宇野・有村論文「飽和集合列挙アルゴリズムを用いた大規模データベースからのルール発見手法」は,巨大データベースから特徴的なパターン・ルールを列挙して役に立つ知識を探索するために,著者らが開発し国際学会のコンテストでも優勝した優秀な飽和集合列挙アルゴリズム LCM を適用することが試みられている.

最小二乗問題や連立一次方程式のためのアルゴリズムは計算推論のみならずありとあらゆる科学技術計算の核となる重要なものである.速水・伊藤論文「GMRES法による最小二乗問題の解法」では,最小二乗問題を正方行列を係数行列として持つ等価な連立一次方程式に変形し,非対称正方行列を係数行列として持つ連立一次方程式用のロバストな反復法である一般化最小残差法を適用することを提案,理論的,数値的な検討が行われている.本論文を通じ,最小二乗問題に対する共役勾配法系統の反復法の現状を知ることでもある.

栗田・村松論文「2次錐計画のサブクラスに対する単体法的アルゴリズムにおけるピボット選択規則について」では,著者の一人が考案した2次錐計画問題に対する単体法的アルゴリズムを実装し,その結果について報告している.元々2次錐計画問題の解法の定番としては内点

法が良く用いられるが、サポートベクターマシンにおける凸2次計画問題の場合がそうであったように、特殊な問題に対しては単体法系統の方法が内点法より高速である可能性もある。そのような問題意識に基づいた新しい接近法の一つとして捉えることもできる。

伊藤論文「双対逐次2次計画および切除平面法による状態制約最適制御問題の解法」では、無限次元最適化の典型例である、状態不等式制約付非線形最適制御問題の双対逐次2次計画と切除平面法に基づく数値解法が紹介されている。中村・上野・樋口論文でとりあげられているデータ同化によって推定される偏微分方程式モデルに従うような系を、さらに予測・制御することを考える時には本論文の延長上の技術が必須となってくるのではないだろうか。

最後に計算推論に関連する基礎数理についての2編の論文を紹介する。

小暮・寒河江論文「パーセント点に集計されたデータからの密度関数の推定—バイアス・パズルの考察—」では、パーセント点に基づいた1次元ヒストグラムからの密度推定のバイアスとカーネル密度推定によるその改良について論じている。裾の長い分布を推定する際にしばしば用いられるパーセント点に基づくヒストグラムに関する奇妙な振る舞いを「バイアス・パズル」として紹介し、その謎解きを行い、標本点ごとに幅を変えたカーネル密度推定法により問題を解消できることを示し、その利点を数値的に検証している。

土谷論文「層別最小二乗法—重み付き最小二乗法の極限—」においては、重み付き最小二乗法の極限として導入される層別最小二乗法について考察し、重み付き最小二乗解と層別最小二乗解の差を、「重み付き最小二乗問題の重み」と「係数行列のある種の条件数」を用いて定量的に評価している。

編集を終えた今、幅広い話題について興味深い論文を本特集にご投稿いただけたことに编者としてはささやかな満足感を覚えている。多忙な中を貴重な時間を割いてご執筆ご投稿いただいた各論文の著者の方々、査読者としてご協力いただいたの方々、そしてこの機会を提供していただいた統計数理編集委員会および编者の無理な注文を聞き入れてご尽力いただいた編集室に心より御礼申し上げたい。

最後に、長年の間、統計数理および計算推論に関する幅広い話題についての議論を通じて编者に貴重な視点を示唆し続けて下さった田邊國士 統計数理研究所名誉教授に深い感謝の意を表したい。