統計数理　第37巻　第2号（1989）

## 公開講演会要旨

# 最適化法の新展開

統計数理研究所　田　辺　國　士

（平成元年11月1日，統計数理研究所 講堂）

統計的データ解析において，その科学性を保証するものは数理的推論である．古典的な数理的推論は，

数理モデル（仮説）⟶（記号的計算）⟶解析的公式⟶（数値的計算）⟶数値的帰結

と図式化できる．実際には，データとつきあわせながらこれを繰り返す．記号的計算の部分に推論の主要部があるので，これを記号的推論と呼んでもよい．しかし，解析的公式を導出できることを前提にすると，モデルは単純できわめて限定されたものしか許されないことになり，大規模で複雑な事象，曖昧模糊とした現象に対処することができない．現代ではコンピュータとソフトウェアの発展によって，より強力な数理的推論の道が拓かれている．そこでは，解析的公式に代わってアルゴリズムが推論エンジンの役割を果たす．記号的計算による解析的公式を介さずに，モデルから直接的に数値的帰結を導くアルゴリズムが発達したため，モデルの構成および操作に大きな自由度が与えられるようになった．これを数値的推論と呼んでもよいであろう．この推論方式のおかげで現象に即した大胆なモデル化が可能となり，モデル構成自体の考え方に大きな変化がもたらされつつある．数値的最適化法は，モンテ・カルロ法などの数値解析的諸方法とならんで数値的推論のための重要な道具を提供する．現代科学・技術の現場において最適化の果たす役割は非常に大きい．

最適化は最適化モデルと最適化法（アルゴリズム）の2つの要素から成り立っているが，世間では「最適化＝最適化法」と狭く解釈する人も多い．しかし，最適化は事象を最適化モデルに定式化する側面にこそその本質がある．現実の問題を解決するために多様なモデルを開発することには社会的要求も強く，また豊かな成果が期待できる最適化のフロンティアであり，この分野の研究に携わる我々もこの面に努力を一層傾けなければならないと思う．

筆者が関わった医学におけるモデリングの3つのケースを述べる．第1の例は肺気道抵抗の推定問題である．肺気道上部から肺胞に至る気道を深さのレベルで24段階に分ける．被験者の気道上部に4～20ヘルツの空気振動を与え，その気道上部における応答圧の17個のデータから，各レベルの気道抵抗を推定する．気道を図1のようにモデル化し，目的関数

$$\begin{aligned}\sum_{f=4}^{20}\|Z_0(f)-Z_c(f)\|^2&+\alpha\left[\sum_{i=0}^{4}(X_i-X_{i+1})^2+\sum_{i=5}^{21}(X_i-2X_{i+1}+X_{i+2})^2\right]\\&+\beta\sum_{i=0}^{22}(Y_i-2Y_{i+1}+Y_{i+2})^2\\&+\gamma\sum_{i=0}^{22}(Z_i-2Z_{i+1}+Z_{i+2})^2\\&+\delta\left(\sum_{i=0}^{24}R_i^2\right)\end{aligned}$$

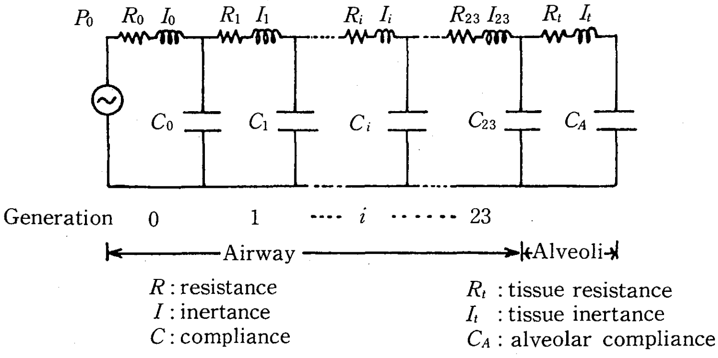


図 1.

を最小化するように 24×3 個のパラメター $X_i$, $Y_i$, $Z_i$ ($i=1,\ldots,24$) を定めると，$R_i$, $I_i$, $C_i$ の推定値が得られる．ただし，

$f$ ： 振動数，
$Z_0(f)$ ： $f$ における観測インピーダンス，
$Z_c(f)$ ： $f$ におけるモデルから計算されるインピーダンス，
$R_i$ ： レベル $i$ におけるレジスタンス，
$I_i$ ： レベル $i$ におけるイナータンス，
$C_i$ ： レベル $i$ におけるコンプライアンス，
$C_0$ ： 静的肺コンプライアンス，

$R_i \equiv \exp(X_i)$, $I_i \equiv \exp(Y_i)$, $C_i \equiv \exp(Z_i)$, $C_0 = \sum_{i=1}^{24} C_i$,

$\alpha$, $\beta$, $\gamma$, $\delta$ は罰金パラメター．

例えば，そのプロファイルは図 2 のようになる．ただし左は健常者，右は疾患のある場合である．第 2 の例は，肺換気能の推定問題である．肺における換気の能率は，高い部分と低いところがあり一様ではない．6 種のガスを被験者に与え，静脈および呼気中のガス分圧の 6 個のデータから換気能がどう分布しているかを推定する．肺のモデルとして，換気能が異なる 50 のコンパートメントを考え，目的関数

$$\sum_{i=1}^{6}\left(\sum_{j=1}^{50} A_{ij}\, p_j - b_i\right)^2 + \alpha^2 \sum_{i=2}^{49} (f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1})^2$$

を最小化するように 50 個のパラメター $f_i$ ($i=1,\ldots,50$) を定めると，$p_i$ の推定値が得られる．ただし，

$p_i$ ： $i$ コンパートメントの割合，
$b_i$ ： $i$ における観測リテンション，
$A_{ij}$ ： $i$ におけるモデルから計算されるガス $j$ のリテンション，

$$p_i \equiv \exp(f_i) \Big/ \left(\sum_{j=1}^{50} \exp(f_j)\right),$$

$\alpha^2$ ： 罰金パラメター．

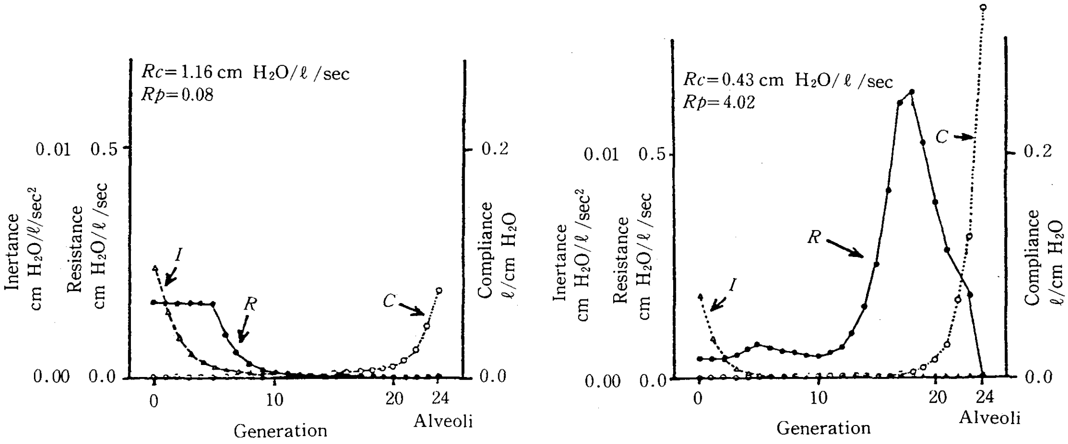


図 2.

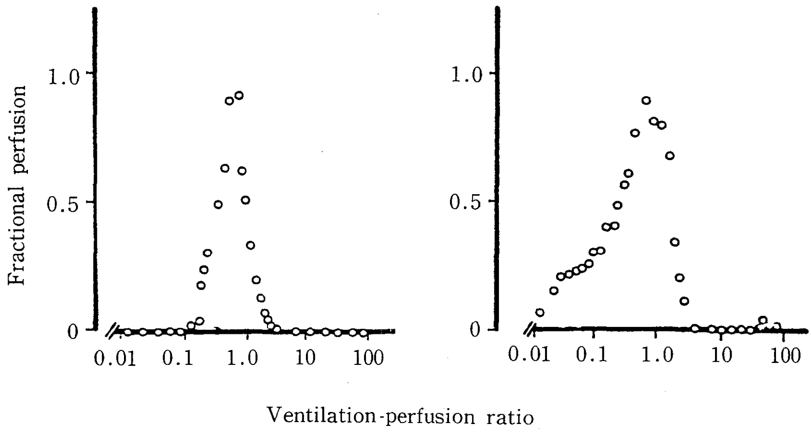


図 3.

例えばそのプロファイルは図 3 のようになる．ただし左は健常者，右は疾患のある場合である．第 3 の例は CT 画像の時系列から脳血流量の分布を推定する問題であるが，紙面の都合で割愛する．

最適化の研究は 1940 年代に開発されたシンプレックス法を軸に理論が発展し，今日数理計画という大きな学問分野を形成するに至っている．数理計画の進歩は，エンジニア達が始めた最適化の研究に，オペレーションズ・リサーチ研究者，数値解析者がつぎつぎと参入することによって推進されてきたといえる．しかし学問として一定の成熟に達した近年，理論面における進歩に飽和の兆しが現れていた．ところが 1984 年に数学者カーマーカーが線形計画の新解法を提案し，最適化の研究が再活性化された．この展開は最適化問題の取扱いにおける局所的な理論から大域的なものへの発展であり，方法論的には解析学から幾何学への歩みであると見ることができ，その意味できわめて自然なものである．最適化が数学の古典的問題である「一定の数学的条件の下である関数を最大（最小）化する」という問題に帰着することを思えば，この新展開に Smale などの純粋数学者達が参与し始めたのもうなずけよう．1988 年に東京で行なわれた数理計画国際シンポジウムにおいても，カーマーカーの方法に関連する発表件数は他

を圧し，危惧の念をいだく人もでるほどであった．しかし，このたびの流行は過去にたびたびあった一時の気まぐれのものと異なり，数理計画の歴史を左右する展開であると思われる．

わが国においては，カーマーカー法については刀根薫氏がいち早く紹介している．また伊理正夫氏による楕円体法との関連を述べた手際よい解説（線形計画法，共立出版）もある．わが国においてもこの方法に触発されて，伊理正夫，今井浩，山下浩，小島政和，水野真治，吉瀬章子，筆者などが新解法を開発している．筆者はニュートン法の立場から研究を進めてきた．一般にニュートン法は，よい初期値がないと収束しないので局所的解法とみなされてきた．しかし，その連続形を考えることにより，大域的な解法を設計することができる．また，ニュートン法は連立不等式系を解く方法に拡張することができる．この方法は，線形計画法のみならず数理計画法一般の従来のアプローチを一新し，最適化理論自体をも改編してしまうほどの可能性を秘めている．最適化法の新たな発展により，一層複雑で大規模な最適化モデルの開発と実用化が促進されることを期待したい．

## 参 考 文 献

Kawashiro, T., Yamasawa, F., Okada, Y., Kobayashi, H. and Tanabe, K. Uneven distribution of blood flow to ventilation-perfusion ratios in lungs estimated by a modified Newton method, *Mathematical Programming* (to appear).

Kobayashi, H., Abe, T., Kawashiro, T., Tanabe, K. and Yokoyama, T. (1987). Estimation of the distribution profile of airway resistance in the lungs, *Computer and Biomedical Research,* **20**, 507-525.

Tanabe, K. (1987a). Centered Newton method for linear programming and quadratic programming, *Proceedings of the 8th Mathematical Programming Symposium, Japan*, 131-152.

Tanabe, K. (1987b). Complementality-enforcing centered Newton method for mathematical programming: Global method, ISM Cooperative Research Report, **5**, "New Methods for Linear Programming", 118-144.

Tanabe, K. (1988). Centered Newton method for mathematical programming, *System Modelling and Optimization* (eds. M. Iri and K. Yajima), 197-206, Springer, Berlin.

田辺國士 (1989a). 中心化ニュートン法，オペレーションズ・リサーチ，**3**，135-138.

田辺國士 (1989b). Centered Newton method for linear programming: Exterior point method, 統計数理，**37**, 146-148.