機械学習研究におけるプログラム開発と検証

モンテカルロ法に基づく確率推論計算を例として

Software Development and Testing for Machine Learning Studies

With an Example of Probabilistic Inference with Monte Carlo Based Methods

牧野 貴樹
Takaki Makino

東京大学 生産技術研究所
Institute of Industrial Science, the University of Tokyo
mak@sat.t.u-tokyo.ac.jp, <http://www.sat.t.u-tokyo.ac.jp/~mak/>

合原 一幸
Kazuyuki Aihara

(同 上)
aihara@sat.t.u-tokyo.ac.jp

keywords: Monte Carlo methods, machine learning, program development, validation, statistical inference

Summary

It is not easy to test software used in studies of machine learning with statistical frameworks. In particular, software for randomized algorithms such as Monte Carlo methods compromises testing process. Combined with underestimation of the importance of software testing in academic fields, many software programs without appropriate validation are being used and causing problems. In this article, we discuss the importance of writing test codes for software used in research, and present a practical way for testing, focusing on programs using Monte Carlo methods.

1. ま え が き

データの背後にある法則性を発見し、適切な予測を実現するための手法として、統計的手法に基づく機械学習技術の研究が盛んになっている。その理由の一つとして、これまでのさまざまな手法を統一的に理解する理論的バックグラウンドとしての統計理論の重要性が再認識されてきたという経緯がある [Bishop 07]。ヒューリスティクスに基づいて開発された精度の高い手法が、統計モデルとして説明ができるといった研究 [Teh 06a] もあり、研究が活発化している。計算機パワーの増大に伴い、はじめから統計モデルの形で学習手法を定義し、確率推論の形で直接解く方法が、実用的になりつつある。

このような学習手法を実現するために欠かせないのが、正確な確率推論プログラムの開発である。特に、ベイズ統計に基づく推論の場合には、問題に合わせたモデルを構築し推論する必要があることから、パッケージ化されたプログラムやライブラリを利用するだけでは必要な計算が行えない場合が多い。新たな確率モデルの提案や機械学習技術を応用した AI システムの構築といった、機械学習に関する研究を行う様々な場面で、必要な確率推論を行うプログラムを開発して利用する必要が生じる。

しかし現実には、プログラムの正確性が確認されないまま、使われてしまう場合が少なくないと思われる。もちろん、プログラムの誤りはどの分野の研究でも起こりうることであるが、特に確率推論にかかわるプログラ

ムの場合、顕在化しない誤りによって致命的な差が生じることが起こりうる。

その最大の理由は、確率推論に関するプログラムでは、正確性の検証が困難なことである。特に、マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法 [伊庭 05] のような乱択アルゴリズムによる確率推論の場合には、プログラムが動作して何らかの結果が得られても、それが正しい結果かどうかを直接確かめることはできない。一般的な数値計算で行われるような、収束の安定性や理論値との誤差の評価などから、プログラムの正確性をある程度確認するといったことも難しい。その結果、「なんとなく大丈夫そうな」(実際にはほとんど検証されていない) プログラムが使われてしまう可能性が、他分野に比べて高いと思われる。

本稿では、特に乱択アルゴリズムに基づく確率推論プログラムに焦点をあてて、研究ソフトウェア開発における検証の必要性を述べ、確率推論プログラムに対して有効な検証手法として筆者らが実践しているものをいくつか紹介する。図 1 に、本論文において取り扱う問題と対策の範囲を示す。本稿が、機械学習の研究を進める上でノウハウとして、何らかの参考になれば幸いである。

2. 機械学習と確率推論

機械学習とは、与えられたデータから、隠れたパターンを発見する手法である [Bishop 07]。もっとも簡単な教師つき学習の枠組みでは、未知の関係で結びつけられた入力 x

図 1 本稿で扱う、研究ソフトウェア開発において発生する問題と対策。黒地に白文字は、確率推論プログラム特有の要素。

と出力 y の n 組の教師データ $D = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ が与えられているときに、テスト入力 x_{n+1} にはどのような出力 y_{n+1} が対応するかを予測するような問題を取り扱うもので、様々な手法が提案されてきた。

たとえば、線形回帰モデルは、入力から計算される基底関数のベクトル $\phi(x)$ (与えられるものとする) をもとに、線形の識別モデル $y(x) = w^T \phi(x)$ を考え、パラメータ w を調節することで、教師データに含まれる規則性を再現することを目指すものである。単純には、線形回帰モデルのパラメータ w は最小 2 乗法によって決定することができる。しかし、基底関数の次元が多い場合には、ノイズに対して過剰にパラメータが変動してしまうため、テスト入力に対して適切な答えを出すことが難しい(過学習)。一方、基底関数の次元が少ないとモデルの表現能力が制限されてしまう。基底関数の次元数を調節したり、パラメータの変動にペナルティを科す正則化項を導入するといった手法もあるが、交差確認等の手法では勾配法が使えないこともあり、次元数、正則化項など

のハイパーパラメータは、数が多い場合には決定が困難になる。また、得られた予測値の確からしさを評価することができないため、予測に基づく決定のコストなど最適化する対象が変わるたびに、パラメータ決定をし直す必要があった。

このような問題に対して、近年、統計学の考え方を導入することで、問題と解決法の統一的な理解が実現できることがわかってきた。たとえば、線形回帰モデルにおけるパラメータは、データを見る前であっても、極端に大きな値は取りにくいという事前知識が存在する [Bishop 07]。ある仮説の確からしさを表現する道具として確率を導入するベイズ統計の枠組みに基づいて、事前知識をパラメータ空間上の確率分布 $p(w)$ の形で事前分布として表現し、そのパラメータからデータが観測される尤度 $p(D|w)$ も確率表現で与えることで、ベイズの定理により、データ観測後のパラメータの事後確率分布 $p(w|D)$ が得られる。実際、事前分布 $p(w)$ をガウス分布で与え、ノイズを含む観測モデルを考えた場合の最大事後確率 (MAP) 解は、2 次の正則化項を与えた最小 2 乗法と等価になることが知られている [Bishop 07]。それだけでなく、パラメータ w を積分消去することで、テストデータに対する答えの予測分布 $p(y_{n+1}|D, x_{n+1})$ (すなわち、予測値の確からしさ) や、コストの期待値を評価できるなど、確率論の枠組みを使うことで、これまでのモデルの応用が格段に広がるのである。さらに、基底関数の次元数などのハイパーパラメータの良さをエビデンス (ハイパーパラメータが与えられた時のデータ尤度) の形で表現できるので、多数のハイパーパラメータもエビデンス最適化によって決定できるし (経験ベイズ)、階層ベイズやノンパラメトリックベイズ手法などの最新の統計的枠組みを適用することで、ハイパーパラメータにも事前分布を考え、積分消去することができるようになってきている [Hjort 10]。適切な生成モデルを用意し、正しい確率推論に基づいて分布を求めることで、従来よりもよい精度の予測が得られ、その理由も理論的に説明できることが多いため、機械学習の領域では確率推論に基づいた研究が増えてきている。

しかし、実用的なモデルの多くは外部から観測できない潜在変数を含むため、パラメータの事後分布や予測分布は複雑な形状になり、解析的に解くことができない。このような場合には、適切な確率推論の近似解法を用いて、問題を解くことが必要になる。ベイズ推定に対する近似解法としては、マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法を代表とするサンプリング法が代表的である。求めたい分布中の点 (サンプル) を、独立同分布で多数収集することで、必要な積分計算を近似することができる。プログラムが比較的シンプルになり、サンプルの数さえあればいくらかでも近似を良くすることができるため、モデルの性能を評価する場面で多く用いられる。また、変分ベイズ法と呼ばれる、解析的に記述できる関数族を与えて近

似し、近似誤差を KL ダイバージェンスで評価して変分法で最小化する手法も、近似誤差が残るものの、計算を高速にできることから、より現実的な規模の問題にも適用できるという利点があり、近年、様々なモデルに対する変分ベイズ解法が提案されてきている。

いずれにしろ、確率に基づく手法の要となるのは、正確な確率推論である。しかし、解きたいモデルごとに必要な推論の仕組みが異なるため、ライブラリなどですべて解決するというのは難しく、構成部品としてライブラリを利用するとしても、一般的には、推論プログラムは解きたい対象のモデルに合わせてテラーメードに開発する必要がある。

3. 研究におけるソフトウェア検証の重要性

上記のような議論をもとに、研究計画を立てようとすると、理論的な美しさ、一見したプログラムの単純さから、コーディングから実験までの期間を過少に見積もりがちである。例えば、サンプリング法はプログラムがシンプルなので、プログラムが完成し、ひととおり動作するようになれば実験ができると考えて計画を立てたものの、プログラムが実験中に次々とおかしい振る舞いを示し、解決するために予想以上の時間を費やしてしまう、という事例は多い。

このような問題が生じる原因として、研究レベルのプログラム開発において、開発したプログラムを検証することの重要性が過小評価されていることを指摘したい。

通常の研究フローのよくあるパターンは、モデルに対応するプログラムをコーディングして、簡単なデータで実行させ、エラーにならずにおおむね期待通りの結果が出ればプログラム完了、締切も迫っているので多少のチューンをしつつ大規模実験に移る、なにか問題が起きればその都度対応、というものである。しかし、「おおむね期待に沿った結果を出す」プログラムと、「正しい」プログラムとの間に実は大きな間隔が広がっており、実は正しくないプログラムのまま実験してしまっている例も少なくないと思われる。また、大規模実験においてプログラムを修正しているうちに、いつのまにか根本的な間違いを混入させてしまう、などといった問題も発生する。

そして、特にこのようなアプローチが問題になる典型例が、サンプリング法を含む乱択アルゴリズムを利用した研究である。理由は単純で、乱数で動作するため「おおむね期待に沿った結果」の範囲が広すぎるからである。また、ほかの計算法で利用できる簡単な検算法（たとえば、反復演算における値——変分ベイズであれば変分下限——の収束の確認など）が利用できないため、計算上の様々な問題が含まれていても気づかないことが多い。そして、そのようなプログラムを大規模なデータに適用して良い結果が出ない場合に、何が原因なのか分からなくなってしまふことになる。

このような問題を回避するためには、特に機械学習などの数値計算に関する研究をする場合には、プログラム開発から実験の間に検証の手順を踏むことを、研究計画の段階から入れておくことが必要である。当然のことであるが、たとえ自分しか使わないプログラムであっても、正しいかどうか確認できないプログラムに基づいた研究をすべきではない。特に、モンテカルロ法など乱択アルゴリズムに属する手法を使う場合には、見かけの簡単さに惑わされずに、十分な検証を実施することが肝要である。

4. 一般的なソフトウェア検証手法

ソフトウェア開発における検証手法に関しては、専門家によって書かれた本が多数あるので、そちらを参照されたい（たとえば [Myers 11]）。しかし、以下での議論で必要なため、ここで簡単に、一般的なソフトウェア開発における検証手法を紹介する。

テストとは「エラーをみつけるつもりでプログラムを実行する過程」である [Myers 11]。具体的には、プログラムに用意した入力を与えた時に、出力が期待される結果と一致するかどうかを調べることになる。一番簡単に実施できるテストは、その場で入力を用意し、実行結果を目視で確認する、いわゆる手動テストであるが、テストの回数だけ手間がかかり、煩雑であるため、コードの変更が困難になる。また、テストの網羅性・一貫性を保つことが難しく、結果的に欠陥を見落とすことも多い。

この問題を解決するには、テストのためのプログラム（テストコード）を用意し、テストを自動化することが有効である [Feathers 04]。一般に、次のような考え方に基づいて検証を実施することが有効であるとされている。

i. テスト対象とは独立にテストコードを書く（ブラックボックステスト）

テスト対象となるコードとは独立に、そのコードが満たすべき条件（入力に対して期待される出力）を検査するコードを書くことで、コード記述時には気付かなかった問題を発見することができる [Beizer 95]。テストコードとはプログラミング言語で書いたプログラムの仕様書である、と考えてもよい。すべての入力の組み合わせに対してテストを実施するのは不可能だが、効率のよいテストのために、代表的な要素を選ぶ様々なヒューリスティクスが知られている [Myers 11, 第 4 章]（振る舞いの異なる代表例、入力範囲の境界値、境界外の値、ゼロなど）。

ii. テストコードはすべてとっておき、まとめて再実行できるようにしておく（回帰テスト）

テストは一回だけ走らせればよいというものではない。一度修正した問題が、他の部分の修正に伴って再発することは多く、多くの時間をロスする原因になる。テストコードはできるだけ使い捨てにせず、プログラムに修正を加えるたびに繰り返し実行できるよう、実験プログラムとは独立してテストを用意し、必要に応じていつでも、

また、すべてのテストを自動的に実行できるようなテストコードを用意することが望ましい [Panzl 78] しかし、回帰テストが増えすぎると、テストにかかる時間が長くなりすぎるという問題もある [Engström 10]。研究で記述する規模のソフトウェアでは、何を回帰テストとして残しておくかは、開発者の視点で決めることになるだろう。

iii. プログラムの各部分を独立にテストする (ユニットテスト)

プログラム全体の動作をテストすることも必要だが、それだけではプログラム中でテストされていない部分が残ることが往々にしてある。こうしたテスト漏れをなくするためには、機能単位 (サブルーチン、クラスなど) ごとにテストを割り当て、各機能単位を十分にテストすることが有効であるとされている [Koskela 12]。テストカバレッジ (テストで実行されたソースコードの部分) を調べることで、テスト漏れを発見する助けとすることもできるが、重要なのは機能単位ごとに満たすべき入出力の仕様が存在し、その仕様を適切に確認するテストが設計されることである。そのための考え方として、先にテストコードを書いて機能単位が満たすべき仕様を確定し、その後にプログラムを書くという方法も提案されている (テスト駆動/ビヘイビア駆動開発) [Beck 02, Chelimsky 10]。

iv. 機能単位の責任を明確化する (Design by contract, 契約による設計)

サブルーチンの仕様を明確化し、設計の安全性を高める方法として、呼び出し行為を呼ぶ側と呼び出される側との契約として捉える考え方がある [McKim 01]。契約が満たされるための条件として、サブルーチンの入り口で守られるべき条件 (事前条件)、出口で守られるべき条件 (事後条件) を考える。サブルーチンを呼ぶ側は事前条件を満たす義務を負う代わりに、呼び出し後に事後条件が満たされるという利益を得る。呼び出される側は、事前条件を前提とできるという利益を得る代わりに、終了時に事後条件を満たすという義務を負う。このようにすることで、呼び出されるサブルーチンの側に誤りがある場合と、サブルーチンを呼ぶ側に誤りがある場合を明確に区別できるようになる。

さらに、オブジェクト指向に基づくプログラムの場合には、データ構造に対しても同様の手法が適用できる。オブジェクトが操作前後で保持しているべき条件 (不変条件) を考え、公開メンバ関数の開始・終了時には必ず不変条件が満たされると考えることで、オブジェクトに対する誤操作の責任の所在も明確化できる。

v. プログラムの実行時にもテストするコードを埋め込む (アサーション)

契約による設計などの形で、プログラムの途中で常に満たされるべき条件が明確になっている場合には、実行時に条件が破られていないかを検査することで、問題を早期に発見できる [Hoare 69]。契約による設計を概念として含むプログラミング言語もあるが [Meyer 91]、通常

表 1 研究でよく使われる言語でのユニットテストフレームワーク

JUnit (Java)	Java 言語上ではもっともよく利用されているテストフレームワーク。他の多くの言語のテストフレームワーク (xTest) の原形にもなっている。
Boost::Test (C++)	テストの追加が簡単であり、研究環境であれば十分な機能を提供している。Boost は他にも実用的な乱数生成器、カイ 2 乗分布を含む統計関数など、様々なライブラリを提供しており、C++ で研究する人は知っておいて損はない。
Test::More (Perl)	古くからある Perl 上のテスト環境。
unittest (Python)	Python 2.1 以降で標準サポート
RUnit (R)	R 言語上でのユニットテストフレームワーク
MATLAB xUnit (MATLAB)	MATLAB 上でのユニットテストフレームワーク

のプログラミング言語でもアサーション構文 (C/C++ の `assert()` マクロ、Java の `assert` 文など) を利用することで、テスト中だけでなく、実行時に常に条件を検査することが可能である [Rogers 01]。たとえば、必ず非零の確率値 p が渡されるという事前条件の関数であれば、`assert (0 < p && p <= 1)` のように引数を検査することで、呼び出し元に稀な誤り (例えば、確率値のアンダーフロー) があった場合に、問題を早期に発見し、その場所を特定することが可能になる。同様に、事後条件・オブジェクト不変条件に関するアサーションを記述することで、サブルーチンやメンバ関数の誤りを発見できる。契約条件に限らず、ループ不変条件、計算の中間値が満たす条件なども検査対象になる。

ブラックボックステストをプログラムの外形的な検証であるとする、アサーションは内部からの検証に相当し、組み合わせることでより厳密なプログラム検証が可能になる。アサーションは、コンパイルオプション等で処理しないようにできるので、大規模データに対する実験時などに効率を落とすこともない (しかしながら、稀な問題を見逃さないためには、大規模データに対しても一度はアサーション有効のまま実行してみるべきである)。

vi. 開発の各段階を保存しておく (バージョン管理)

開発においてソースコードを変更していく履歴を残すことで、問題が発生したときに、いつから問題が発生したのかといったことを調べ、修正することが容易になる [Spinellis 05]。時々ソースコードをディレクトリごと圧縮しておくという程度でもよいが、ここでは Subversion^{*1} や git^{*2}、Team Foundation Server (Microsoft) などのバージョン管理システムの利用を勧めたい。一般に、バージョン管理システムは、複数人で開発するときのコード共有ツールであると思われることが多いが、1 人での開発でも有効である。実験時にリビジョンを確定させておくことで、変更点を後から確認することが容易になる。また、異なる環境 (大学のデスクトップと計算機センター、自宅のノート PC など) でのソースコードの同期が容易になり、バックアップも同時に取れる、等のメリットもある。

*1 <http://subversion.tigris.org/>

*2 <http://git-scm.com/>

```

#include <iostream>
#include <vector>
#include <cassert>
#include <ctime>
#include <boost/random.hpp>
#include <boost/lexical_cast.hpp>
#ifdef _OPENMP // OpenMP 環境
#include <omp.h>
#else // 非 OpenMP 環境
#define omp_get_max_threads() 1
#define omp_get_thread_num() 0
#endif

using namespace std;

// Boost メルセンヌツイスタに基づく乱数生成器を使用
typedef boost::uniform_01<boost::mt19937> rgen_t;
// 各スレッドごとの乱数生成器のベクトル
extern vector<rgen_t> rgenvec;

// 自スレッドで利用できる乱数生成器の参照を得る
inline rgen_t& get_rgen() {
    assert( omp_get_thread_num() < rgenvec.size() );
    return rgenvec[ omp_get_thread_num() ];
}

// 乱数生成器から [0,1) の一様乱数を得る
inline double uniform01() {
    return (get_rgen())();
}

// パラメータ初期化用関数 (環境変数の参照)
template <class T>
inline T getenvif( const char *name, T defval )
{
    assert( name != NULL );
    const char *env = getenv(name);
    if( env ) return boost::lexical_cast<T>(env);
    else return defval;
}

// 乱数生成器の初期化関数
inline void initialize_rand()
{
    // 時刻とプロセス ID からシード値を合成
    unsigned int SEED = getenvif("SEED",
        std::time(NULL) + getpid() * 10000u );
    int nthreads = omp_get_max_threads();
    // 各スレッド用の乱数生成器を準備
    for( int i=0; i<nthreads; i++ )
        rgenvec.push_back( rgen_t(
            boost::mt19937(SEED+i) ) );
    cout << "シード値 " << SEED << endl;
    cout << "スレッド数 " << nthreads << endl;
}

```

図 2 omprand.h: C++ で OpenMP 使用時に、各スレッド毎に乱数生成器を持たせるコードの例。

テストコードの記述はストレスのたまる作業であるが、テストの開発および自動化を支援するためのフレームワークとして、多種多様なライブラリが提供されており、それらを使うことで負担はかなり軽減される。特に、ユニットテストに関するものは個人でも使いやすいものが多く、表 1 で示す例のほかにも、現在利用可能なプログラミング言語のほぼすべてで様々なテスト環境が提供されている。また、Eclipse、Visual Studio などの最近の統合開発環境では、テスト関連を含めた様々な機能が組み込み・プラグイン形式で提供されており、マウスでクリックするだけでテストコードのひな形生成やテストカバレッジの表示 (Visual Studio 2008 では Professional Edition 以上)、バージョン管理システムとの同期などが実現できる。これらの環境を利用して開発しているのであれば、これらの支援機能についても調べてみる価値はあると思われる。

5. モンテカルロ法の計算プログラムに対する検証技術

どのようなプログラムでも適切に検証することは容易ではないのだが、モンテカルロ法などの乱択アルゴリズムは段違いに検証が難しい。その理由として次の 2 点が挙げられる。(1) 異常があった場合に、現象の再現が困難。(2) 乱数に基づく結果の検証そのものが簡単ではない。

以下では、これらの問題を解決する方法について、モンテカルロ法に基づくプログラムを念頭に置いて説明する。

5.1 再現性のある実行環境の確保

アサーションでの異常検出、ゼロ除算、メモリ管理の問題など、明らかなプログラムの実行エラーが発生した場合でも、その事象を再現できなければ、プログラムの修正は困難である。通常のプログラムであれば、同じ入力を与えることで問題を再現できることが多いが、乱数で動作するプログラムの場合、実行毎に異なる乱数値が得られると、問題が再現しない場合が多い。

そのような場合に有効な手法として、擬似乱数のシード値の固定がある。シード値を固定することで、毎回同じ乱数列が与えられることが保証できるので、計算過程を何回も再現できるようになり、異常な値がどこから来たかを調べることも可能になる。実験時にはシード値を変えて何度か実行することになる^{*3}が、その場合でも、利用したシード値を実験結果とともに保存しておくのがよい。大規模実験時に問題が発生した場合、同じシード値・同じ入力データで assert を有効にしたプログラムを実行することで、問題を特定できる場合がある。

ただし、並列計算を利用している場合などでは、乱数関数の呼び出し順序が毎回変わってしまうため、シード値を単純に固定する方法がうまくいかないことがある。そのような場合、まず、乱数生成器のインスタンスをスレッド毎に持たせることを検討すべきである。そもそも通常の乱数生成関数は再入可能ではないので、内部で排他ロック制御を行っている。乱数生成器のインスタンスをスレッド毎に持たせると、排他ロックの待ち時間が不要になり、プログラムの実行効率も上昇する^{*4}。そのう

*3 検証技術からは外れた話になるが、シード値を作るときに `time()` 関数などのシステム時刻の値を使う慣習があるが、特に最近のマルチコア環境では、同じ時刻に複数のジョブが実行されると、すべてのジョブで同じシード値が使われてしまう危険性がある。時刻だけでなく、プロセス ID などのジョブ毎に異なる数値と組み合わせるか、UNIX 系 OS であれば `/dev/random` などのシステムが提供する擬似乱数発生器を利用したシード値の設定を検討すべきである。

*4 厳密を期す場合、複数の生成器で乱数が同期してしまう問題を選避るために、多ストリーム対応が保証された乱数生成器を利用することが望ましい (例えば [Mascagni 00]) が、これらの公開ライブラリで生成できるのは一様乱数に限られ、研究の場面においては使いにくい。複数インスタンスの乱数生成器を使うことには同様の保証はないが、メルセンヌツイスタ等の高品質で長周期の乱数生成器を異なるシード値で初期化することは、jump-ahead 法 [Haramoto 08] の近似とみなすことができ、機械

図3 infinite HMM の定義とグラフィカルモデル.

図4 iHMMにおいて出力列 ABAC に対する隠れ状態列の理論分布の例。円内の数字はリナンバリングされた隠れ状態、実線矢印は状態発展、破線矢印は出力、矢印に付加された数値は生成確率の期待値を表す。確率分岐に沿って期待値の積を取ると生成確率の理論分布が得られ、生成確率の和 Z で正規化することで出力列観測後の事後分布が計算できる。確率値の計算においては、出力記号は 10 種類、 $\gamma = \alpha = 1$ とした。

えで、各スレッドへのジョブ配分・結果の統合順序を静的に決定しておくことで、並列計算環境でも結果を再現可能にすることはできる (図 2) *5。

5.2 モンテカルロ法の結果に対する検証

機械学習などの数値計算を含むプログラムの場合には、各部分をテストするコードに加え、記述したアルゴリズムが予想通りの答えを返すかどうかを調べることが必要である。具体的には、非常に小規模なデータに対して理論値を導出し、プログラムを実行した結果と等しくなるかどうかを確認することである。大規模なデータに対す

る結果に問題がある際に原因をたどることは難しいが、小規模な問題であれば、理論値の導出過程との比較をするなどの方法で、問題を同定することが可能である。

しかし、MCMC 法などの乱数を含むアルゴリズムの場合、ある時点でのサンプリング結果に対してこのような検証をすることはできない。そもそも、乱数での出力であるため、多くの値が理論的にありえる値となり、実質的な検証ができない。

本来、モンテカルロ法は、サンプル分布が求めたい確率分布になっているというものであり、テストコードもこの性質をテストすべきである。言い換えると、モンテカルロ法のテストコードは、サンプリングされた結果を収集して何らかの特徴に関する経験分布を作り、統計的検定手法に基づいて理論分布と比較する必要がある。

ここで、どの特徴を対象にすべきかは、問題の性質に依存するものであり、簡単には決められない。例として、筆者らが取り組んだ HMM の問題の例を挙げる。研究の対象は、infinite HMM [Beal 02, Teh 06b] と呼ばれる隠れ状態数についても統計的に決定する HMM のノンパラメトリックベイズ拡張モデルである (図 3)。与えられた観測列に対する事後分布を推定するためには、隠れ状態列の事後分布と遷移行列・出力行列の事後分布を同時に推定する必要があるため、筆者らは MCMC 法を適用し、隠れ状態列と遷移行列・出力行列を交互にサンプリングするプログラムを開発した。このプログラムのテストのために、非常に短い観測列 (ここでは 4 ステップ) に対するサンプリング結果の分布を検証する。

この場合、サンプリングされた隠れ状態のラベルの分布を作っても、隠れ状態のラベルは交換可能なので、意味のある分布は得られない。もう少しよいのは、サンプルにおける隠れ状態列の中で使われている隠れ状態の異なり数 (重複排除後の個数) を考えることである。特に、infinite HMM においては、隠れ状態数についてもデータから統計的に決定する枠組みであるので、その分布については確認しておきたい。しかし、4 ステップの入力においては、利用される隠れ状態数は高々 4 個であり、サンプリングされる隠れ状態列の分類としては荒い。このような分類の上では、分布の違いは検出できるが検出力が弱く、また違いがあると分かった場合にも、問題を追跡するのが困難である。

最終的にテストに利用したのは、隠れ状態を登場順に 1, 2, 3, ... とリナンバリングした結果の隠れ状態列である。「1111」は 4 ステップすべて同じ隠れ状態としてサンプリングされたことを示し、「1223」は、2 ステップ目と 3 ステップ目だけが同じ隠れ状態で、その他は異なる隠れ状態としてサンプリングされたことに対応する。これにより、ラベルの交換可能性の問題を回避しつつ、15 項からなる離散分布を得ることができる (図 4)。この分布の理論分布を計算し (具体的方法は後述)、サンプリング分布を検定することで、サンプリングプログラムの間違

学習のような場面では許容できる方法であると考えている。低品質の擬似乱数 (C 言語標準の rand() 関数など) は、並列化しない場合でも、乱択アルゴリズムの研究に使うべきではない。

*5 とはいえ、決して並列処理の導入を推奨するわけではない。むやみに並列処理を導入すると、並列処理特有の問題が発生したり、計算順序の変化により確率的に不正確な推論になる可能性もあるため、どうしても必要な場合以外は並列化すべきでない。やむなく並列化する場合は、並列化する領域を慎重に検討することに加え、十分なテストを実施することが肝要である。

```
#include <cfloat>
#include "omprand.h"
// テスト対象: (1,...,s) の順列をランダム生成するクラス
class RandPerm {
    int _s;
public:
    RandPerm(int s): _s(s) { assert( s>=0 ); }
    int size() const { return _s; }
    vector<int> generate() { // ランダム順列の生成
        vector<int> v(_s);
        for( int i=0; i<_s; i++ )
            v[i] = i+1; // 1,...,s を配列にセット
        for( int i=0; i<_s; i++ ) {
            int j = (int)floor( uniform01() * _s );
            swap( v[i], v[j] );
        } // 各要素を順にランダムな要素を交換する
        return v;
    }
};
```

図5 perm.h: テスト対象となる(誤った)C++コード。

いを検出し、問題を修正することが可能になった。

ここで解説したリナンバリングによる交換可能性の回避は、iHMM だけでなく、LDA [Blei 03] などの交換可能な隠れ変数を含むモデルであれば同様に適用可能である。

5.3 統計的検定手法に基づくサンプル分布の検定

正しいサンプリング法であっても、経験分布と理論分布の間にはズレが残る。サンプル数を増やしていけば理論分布にどんどん近づくはずではあるが、どのような結果であれば、現在のプログラムは正しいサンプリングをしているといえるだろうか。これは、いわゆる古典的統計学における検定の問題である。テストを実施するためには、適切な検定法を選び、検定を行うプログラムを書かなければならない。どの検定法を使うかを選べなければ、統計計算のライブラリを使うことも難しい。

特にサンプリングに基づく研究を行うのであれば、基本的な検定方法について、統計学の基礎 (例えば [東京 92]) に立脚することが大切である。たとえば、今回のようにサンプル数に制限がない場合では、ピアソンのカイ 2 乗検定が比較的使いやすい。以下では、カイ 2 乗検定を使った検証法を紹介する。

観測ごとに K 個の排他的事象 $\{1, 2, \dots, K\}$ の 1 つが観測される場合に、カイ 2 乗検定においては、「観察された事象の相対的頻度がある頻度分布 p_k に従う」という帰無仮説を検定する。 N 回の観測を繰り返して事象 k が O_k 回観察されたとき、帰無仮説が成り立つ場合は、各事象の期待観測回数 $E_k = N \cdot p_k$ に基づくカイ 2 乗統計量 $\chi^2 = \sum_{k=1}^K (O_k - E_k)^2 / E_k$ は自由度 $K - 1$ のカイ 2 乗分布に従う。通常の検定においては、有意水準をあらかじめ定める ($p=0.01$ など) ことで、カイ 2 乗の水準値を決めることが可能になる。すなわち、計算されたカイ 2 乗値がその水準を上回るときには、帰無仮説が棄却され、「観測した分布は期待分布と有意に異なる」、すなわちプログラムが間違っているという結論が示唆される。一方、カイ 2 乗値が水準値を下回る場合は、「観測した分布は期

```
#include <unistd.h>
#include <boost/math/distributions/chi_squared.hpp>
#include "perm.h"
#define BOOST_TEST_DYN_LINK
#define BOOST_TEST_NO_MAIN
#include <boost/test/unit_test.hpp>

// 乱数生成器の配列の実体定義 (図 2)
vector<rgen_t> rgenvec;

// PermRand(sz) の k 番目の値の分布をテストする関数
void TestPerm( int sz, int k )
{
    assert( sz > k );
    int N = getenvif("N", 10000 ); // 図 2
    double P = getenvif("P", 0.001 );

    RandPerm perm(sz); // 図 5
    double o[sz], e[sz]; // 観測数, 期待値
    // 観測数を 0 初期化, 期待値を計算
    for( int i=0; i<sz; i++ ) {
        o[i] = 0;
        e[i] = N * 1.0 / sz;
    }
    // 順列を N 回生成
    for( int i=0; i<N; i++ ) {
        vector<int> vec = perm.generate();
    }
    // 順列の性質を満たしていることを確認
    BOOST_CHECK_EQUAL( vec.size(), sz );
    for( int j=1; j<=sz; j++ )
        BOOST_CHECK( find(vec.begin(),
                           vec.end(), j) != vec.end() );
    // k 番目の観測をカウント
    o[ vec[k]-1 ] += 1.0;
}

// ^2 統計量を計算
double chisq = 0;
for( int i=0; i<sz; i++ )
    chisq += (o[i]-e[i]) * (o[i]-e[i]) / e[i];

// ^2 分布で片側検定
boost::math::chi_squared_distribution<>
    chisq_dist( sz-1 );
double ulim = quantile( chisq_dist, 1-P );
BOOST_CHECK_MESSAGE( chisq < ulim,
    "genparm(" << sz << ", " << k << ") 分布異常 "
    << "正しいプログラムがこの分布を出す確率"
    << cdf( complement( chisq_dist, chisq ) )
    << "は、有意水準" << P << "以下です" );

// Boost テストケース: クラスに対する通常のテスト
BOOST_AUTO_TEST_CASE( Test_PermRand )
{
    RandPerm perm0(0), perm1(1);
    BOOST_CHECK_EQUAL( perm0.size(), 0 );
    BOOST_CHECK( perm0.generate().empty() );
    BOOST_CHECK_EQUAL( perm1.size(), 1 );
    BOOST_CHECK_EQUAL( perm1.generate().size(), 1 );
    BOOST_CHECK_EQUAL( perm1.generate()[0], 1 );
}

// Boost テストケース: 分布のテスト
BOOST_AUTO_TEST_CASE( Test_PermRand_Dist )
{
    // テストするパラメータ値のセット
    int values[9][2] = { {2,0}, {3,0},
        {4,0}, {2,1}, {3,1}, {4,1}, {3,2}, {4,2}, {4,3} };
    // タスクを並列実行 (静的分配)
#pragma omp parallel for schedule(static)
    for( int i=0; i<9; i++ )
        TestPerm( values[i][0], values[i][1] );
}

// main 関数 (テストケースを順に実行)
bool init_test() { return true; }
int main( int argc, char *argv[] )
{
    initialize_rand(); // 乱数の初期化 (図 2)
    return boost::unit_test::unit_test_main
        ( &init_test, argc, argv );
}
```

図6 permtest.cpp: perm.h に対する C++テストコードの例。

待分布と有意に異なるとはいえない」, すなわちプログラムの間違いは検出できなかったという結論になる。

この方法は、観測されるものが離散値であれば(たとえば隠れ状態の並び方など), そのまま適用できるし、指数分布などの連続値である場合には、区間を適当な K 個に分割したヒストグラムを求め、理論的なヒストグラム形状との間でカイ 2 乗検定を実施すればよい。同じ有意水準でも、サンプル数が増えれば、より微妙な間違いに対する検出力は強くなる。

例として、図 5 で示すサンプリングアルゴリズムに対するテストプログラムを図 6 に示す^{*6}。実行すると、テスト失敗のメッセージが表示されることから、一見正しく見える図 5 のアルゴリズムは誤った分布を作ることがわかる^{*7}。このような誤りが、後で様々なトラブルを引き起こし、研究時間を浪費することは想像に難くない。テストによって早期発見することの重要性が窺える。

この例ではサンプルが無相関なので、通常の検定手法をそのまま適用できるが、MCMC 法では一般にサンプル間に相関があるため、全サンプルを対象に通常のカイ 2 乗検定を実施すると、棄却という結果になることが多い。相関がなくなるくらい十分に広い間隔でサンプルを収集すれば通常の検定が可能であるが、「十分に広い間隔」の基準が明確でなく、テストに必要な計算時間が不必要に増大してしまうという問題がある。それよりは、混合時間 T のマルコフ連鎖を使ったモンテカルロ法のサンプルに対してカイ 2 乗統計量を計算すると χ^2/T がカイ 2 乗分布に従う性質を利用するほうがよい。一般に混合時間 T を知ることは難しいが、10000 個程度の少ないサンプル数に対する χ^2 統計量から T の上限として適当な定数を見積もり、サンプル数を増やしても傾向が変わらないかどうかを調べることができる。一方、分布が間違っている場合には、サンプル数を増やせば増やすほど χ^2 統計量の値が増加していくことから、区別が可能である。あるサンプリング法とテストデータに対して、いったん正しいと思えるプログラムができて、混合時間 T の推定値が得られたならば、回帰テスト中にその推定値を埋め込むことで、その後にコードが変更されても、分布が変化していないことを確認することが可能となる。

5.4 詳細釣り合い条件の検査による問題の同定

上記の方法で、サンプリングしている分布が間違っているという結論が出た場合でも、どの部分が間違っているのが分からない、という事態は往々にして生じる。特に、違いが小さい場合に、その微小な差がプログラムのどの部分から生じるのかの追跡は簡単ではない。

しかし、マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法を利

用したプログラムであれば、詳細釣り合い条件の成立を調べることで、より詳細な問題を同定することができる場合がある。ここでは、MCMC 法のプログラムに限定して、詳細釣り合い条件の検査法を説明する。

MCMC 法を用いた実用的なアルゴリズムのほとんどは詳細釣り合い条件を満たす——すなわち、定常分布をサンプリングしているのであれば、サンプリング状態 s_1 から状態 s_2 への遷移確率と状態 s_2 から状態 s_1 への遷移確率が等しくなるよう設計されている。これをプログラムの実行経過から確認するには、各サンプリング状態 s をカイ 2 乗検定で使った排他的事象の形で表現したうえで、すべてのサンプリング状態の組 (s_1, s_2) に対して、サンプリングの各ステップで s_1 から s_2 への状態変化の回数 $n(s_1, s_2)$ をカウントし、 $n_1 = n(s_1, s_2)$ と $n_2 = n(s_2, s_1)$ が同一の確率分布から出ているかどうかを検定することになる。これはいわゆる符号検定であるが、十分なサンプル数があれば(経験的には n_1, n_2 が 10 以上であれば) $Z = (|n_1 - n_2| - 1) / \sqrt{n_1 + n_2}$ が正規分布で近似できることから、両側確率を計算する(分子の -1 はバイアスの修正である。 $n_1 = n_2$ のときは計算不要なので除外する)。

このとき、検定の有意水準 (p 値) は、状態遷移の組の多さに応じて事前に決定すべきである。たとえば正しい分布から得られたデータでも p 値を 0.05 に設定した場合、100 組の状態遷移を検定すると 5 回程度は問題が誤検出されてしまう。筆者らは、状態遷移の組が数百組程度のときに、 p 値を 0.001 ぐらいに設定して検定している。それでも、サンプル数を増やししながら何回かテストすることで、ほとんどの問題は発見できる。また、一か所の詳細釣り合いが崩れていると、他の場所でも影響されて詳細釣り合いが崩れることがあることに注意されたい。ずれの大きい遷移を対象を絞り、その遷移を起こすときのプログラムの計算過程を詳細に調べることで、何らかの原因が見つけれられると思われる。

5.5 確率モデルに対する理論値の計算

比較対象となる理論値の計算は、確率モデル検証における不可欠のステップである。簡単なモデルであれば、簡単な表計算ソフトなどを利用した手計算で導出できる。たとえば、生成的確率モデルであれば、確率的な生成過程の各ステップを追うことで、すべての可能な隠れ状態の系列 z と出力の系列 s に対する生成確率の分布 $p(z, s)$ を導出できる。推論プログラムが計算するのは、与えられた出力系列に対する隠れ状態の条件付き分布 $p(z|s)$ であるが、すべての可能性のうちから、出力が一致する場合だけを切り出し、合計が 1 になるよう正規化することで、以下のように理論分布が求められる:

$$p(z|s) = \frac{1}{Z} p(z, s), \quad Z = \sum_{z'} p(z', s).$$

しかし、infinite HMM のような複雑な確率モデルの場合、理論値を計算することは簡単ではない。中華料理店過程

*6 `g++ -fopenmp permtest.cpp -lboost_unit_test_framework -mt -o permtest` でコンパイルできる (GCC 4.x 環境で Boost が適切にインストールされている場合)。

*7 正しくは $s!$ 個の順列から選択されるよう下線部を変更する。
`int j = (int) floor( uniform01() * (i+1) );`


```

% sample( +DIST_IN, ?DIST_OUT, ?VAL, +P_IN, ?P_OUT )
% 分布 DIST_IN からサンプリングされる値 VAL をバックトラックで列挙し,
% P_IN * (VAL が DIST_IN からサンプリングされる確率) を P_OUT に返す.
sample( uniform(L, U), uniform(L, U), V, P, POUT ) :- POUT is P / (U - L + 1), uniformi(L, U, V).
sample( infinite(IN), infinite(OUT), IN, P, P ) :- OUT is IN + 1.
sample( crp( TBLs, ALPHA, BASE ), crp( NEWTBLS, ALPHA, BOUT ), X, P, P2 ) :-
    length( TBLs, L ), P1 is P / (ALPHA + L), crpi( TBLs, NEWTBLS, X, ALPHA, P1, P2, BASE, BOUT ).

% sample 内部で利用する述語. 一様分布, 中華料理店過程の列挙
uniformi( L, U, V ) :- V = L ; L < U, L1 is L + 1, uniformi( L1, U, V ).
crpi( [X|T], [X,X|T], X, _, P, P, BASE, BASE ).
crpi( [Z|TIN], [Z|TOUT], X, ALPHA, P, POUT, BASE, BASEOUT ) :-
    crpi( TIN, TOUT, X, ALPHA, P, POUT, BASE, BASEOUT ).
crpi( [], [X], X, ALPHA, PIN, POUT, BASE, BASEOUT ) :-
    P is PIN * ALPHA, sample( BASE, BASEOUT, X, P, POUT ).

% find( +LIST_IN, -LIST_OUT, +KEY, +PRIOR, ?DIST, ?DIST_OUT )
% 分布の連想配列 LIST_IN から, KEY に対応付けられた分布を探し DIST に返す.
% LIST_OUT は, LIST_IN の中で DIST を DIST_OUT に更新したものを返す.
% KEY が見つからない場合, DIST は PRIOR と等しくなり, LIST_OUT には KEY -> DIST_OUT が追加される.
find( [ KEY -> DIST | T ], [ KEY -> DISTOUT | T ], KEY, _, DIST, DISTOUT ) :- !.
find( [ H | R ], [ H | ROUT ], KEY, DEF, DIST, DISTOUT ) :-
    find( R, ROUT, KEY, DEF, DIST, DISTOUT ).
find( [], [ ( KEY -> DISTOUT ) ], KEY, DEF, DEF, DISTOUT ).

% keymap( +KEY, +LIST_IN, -LIST_OUT, ?DIST_IN, ?DIST_OUT )
% 分布の連想配列 LIST_IN から, KEY に対応付けられた分布を探し DIST に返す.
% iHMM で利用される各々の KEY に対して, 適切な事前分布を構成し, 述語 find/6 に渡す.
keymap( emit(X), L, LOUT, DIST, DISTOUT ) :-
    find( L, LOUT, emit(X), crp( [], 1.0, uniform( 0, 9 ) ), DIST, DISTOUT ).
keymap( trans_base, L, LOUT, DIST, DISTOUT ) :-
    find( L, LOUT, trans_base, crp( [], 1.0, infinite(1) ), DIST, DISTOUT ).
keymap( trans(X), L, LOUT, DIST, crp(DO1, DO2, BASEOUT) ) :-
    find( L, L1, trans(X), crp( [], 1.0, BASE ), DIST, crp(DO1, DO2, BASEOUT) ),
    keymap( trans_base, L1, LOUT, BASE, BASEOUT ).

% simulate( +STATE_LIST, +SYMBOL_LIST, +LIST_IN, +P_IN, -P_OUT )
% iHMM で隠れ状態列 STATE_LIST, 出力記号列 SYMBOL_LIST を出力する確率の計算
simulate( [PREV, NEXT|T1], [SYMBOL|T2], LIN, PIN, POUT ) :-
    keymap( trans(PREV), LIN, L1, D1, D1O ), sample( D1, D1O, NEXT, PIN, P1 ),
    keymap( emit(NEXT), L1, L2, D2, D2O ), sample( D2, D2O, SYMBOL, P1, P2 ),
    simulate( [NEXT|T1], T2, L2, P2, POUT ).
simulate( [], [], _, P, P ).

% query( +SYMBOLS ): 記号列 SYMBOLS に対応するすべての隠れ状態列と確率を列挙
query(SYMBOLS) :-
    findall( STATES -> P, simulate( [ 0 | STATES ], SYMBOLS, [], 1, P ), OUT ), writeln( OUT ).

```

図7 ihmm.pl: infinite HMM に対応する確率の理論値を計算する Prolog プログラム.

(CRP) [Aldous 85] を階層化した表現を用いることで, 逐次的な確率過程の形で理論値を計算することは可能だが, 図4のような理論値を手計算で導出することは難しい. 検査用のデータを小さくすれば簡単になるが, iHMM のプログラムを十分に検証するには, 長さ4の出力列が最低限必要である^{*8}. 理論値の計算のためにサンプリングプログラム自身を拡張するのは, コードが不必要に複雑化することから避けるべきである.

ここでは, 正確な生成確率を計算するために, 別に専用のプログラムを記述することを提案する. 特に, CRP などの逐次的な確率過程に対しては, Prolog などの論理型言語を利用することで, すべての場合分けを網羅し, 確率値を計算することが容易になる. 図7は, iHMM に対する確率計算プログラムの例である. `consult(ihmm)`. で Prolog に読み込ませ, `query([1,2,1,3])`. で, 出力列 [1,2,1,3] に対応する状態列と確率値の組を列挙することができる (簡単のため, 計算の細かい場合分け別の生成確率 $p(s, z)$ 値を表示させているが, もちろん Prolog

上で状態列ごとに集計し, 値を正規化することも可能で, 図4の結果が得られる).

このような論理型言語を使う手法は, iHMM 以外の確率モデル (LDA, CRF など) であっても, 同様に有効であると考えられる. 確率発展を節として記述するだけで, すべての可能性と確率値を列挙できる簡便性は, バックトラックが組み込まれている論理型言語ならではの使い方であろう.

6. む す び

本稿では, 機械学習分野, 特にサンプリングなどの乱択アルゴリズムの実装を含む領域の研究においてはプログラムの検証が重要となることを論じ, その検証の実践的手法について紹介した. すなわち, 質・量ともに十分なテストコードを記述すること, 問題が再現できるよう乱数のシード値を制御すること, サンプリング結果を検証するには出力されたサンプル分布に対して統計的検定手法を用いること, テストでの比較対象となる理論値の導出のためにも専用プログラムを開発することである.

^{*8} 長さ3以下の出力列ではハイパーパラメータ α が計算結果に影響しないため α に関わる部分を検証したことになる.

研究に使うプログラムは、正しく動作していることが大前提であり、検証を実施したとしても論文には反映されないのが現状である。検証は、いわば、裏方の仕事と言ってもよい。それでも、ここで検証の重要性を改めて説くのは、そのようにしてプログラム検証に十分な時間を割くことで、あとから無駄にする時間が減り、結果的に早く結果を出せることが多いからである。特に、モンテカルロ法などの乱択アルゴリズムを用いる場合、しっかりした手法で検証を行わなければ、プログラム中の問題を見逃す危険性が高い。そして、そのようにして見逃された問題が、あとで様々なトラブルを生み、それらの解決には長い時間を要することになることは、しばしば経験することである。

もともとは、サンプリングなどの統計的計算手法は主に統計学の領域で研究されてきており、統計学分野の研究者はこうした性質のデータに対する検証手法を熟知していたため、問題になることが少なかったのではないと思われる。しかし、人工知能、機械学習などの他分野の研究者が統計的手法を利用するようになってきているにもかかわらず、このような検証の必要性に関する情報は、十分に与えられていないのが現状である。本稿のような知識を共有することで、今後の本研究領域の発展につながれば幸いである。

謝 辞

本研究は、総合科学技術会議により制度設計された最先端研究開発支援プログラム（FIRST 合原最先端数理モデルプロジェクト）により、日本学術振興会を通して助成されたものである。また、本研究の一部は科学研究費補助金（若手 B）20700126 の助成を受けた。テストが必要なアルゴリズム例は奥牧人さんの提供である。吉田康久さんには草稿に有益なコメントをいただいた。

◇ 参 考 文 献 ◇

- [Aldous 85] Aldous, D.: Exchangeability and related topics, in *École d'été de Probabilités de Saint-Flour XIII—1983, Lecture notes in mathematics 1117*, pp. 1–198, Springer Verlag (1985)
- [Beal 02] Beal, M. J., Ghahramani, Z., and Rasmussen, C. E.: The Infinite Hidden Markov Model, in *Advances in Neural Information Processing Systems*, Vol. 14, pp. 577–584, MIT Press (2002)
- [Beck 02] Beck, K.: *Test Driven Development: By Example*, Addison-Wesley (2002), 邦訳『テスト駆動開発入門』（長瀬 嘉秀（監訳）、ピアソンエデュケーション, 2003）
- [Beizer 95] Beizer, B.: *Black-Box Testing: Techniques for Functional Testing of Software and Systems*, Wiley, NY (1995)
- [Bishop 07] Bishop, C. M.: *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer (2007), 邦訳『パターン認識と機械学習 上/下 – ベイズ理論による統計的予測』（元田 浩ほか（訳）、丸善出版, 2007）
- [Blei 03] Blei, D. M., Ng, A. Y., and Jordan, M. I.: Latent Dirichlet Allocation, *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 3, No. 4–5, pp. 993–1022 (2003)
- [Chelmsky 10] Chelmsky, D., Astels, D., et al.: *The RSpec Book: Behaviour Driven Development with Rspec, Cucumber, and Friends*, Pragmatic Bookshelf (2010), 邦訳『The RSpec Book』（角谷 信太郎、豊田祐司（監修）、翔泳社, 2012）

- [Engström 10] Engström, E., Runeson, P., and Skoglund, M.: A systematic review on regression test selection techniques, *Inf. Softw. Technol.*, Vol. 52, No. 1, pp. 14–30 (2010)
- [Feathers 04] Feathers, M.: *Working Effectively With Legacy Code*, Prentice Hall, NJ (2004), 邦訳『レガシーコード改善ガイド』（平澤 章 ほか（訳）、翔泳社, 2009）
- [Haramoto 08] Haramoto, H., Matsumoto, M., Nishimura, T., Paneton, F., and L'Ecuyer, P.: Efficient Jump Ahead for F2-Linear Random Number Generators, *INFORMS Journal on Computing*, Vol. 20, No. 3, pp. 385–390 (2008)
- [Hjort 10] Hjort, N. L., Holmes, C., Müller, P., and Walker, S. G. eds.: *Bayesian Nonparametrics*, Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Cambridge University Press (2010)
- [Hoare 69] Hoare, C. A. R.: An axiomatic basis for computer programming, *Comm. ACM*, Vol. 12, No. 10, pp. 576–583 (1969)
- [伊庭 05] 伊庭 幸人, 種村 正美, 大森 裕浩, 和合 肇, 佐藤 整尚, 高橋 昭彦: 計算統計 II マルコフ連鎖モンテカルロ法とその周辺, 統計科学のフロンティア, 第 12 巻, 岩波書店 (2005)
- [Koskela 12] Koskela, L.: *Unit Testing in Java*, Manning (2012), e-book provided in early access program
- [Mascagni 00] Mascagni, M. and Srinivasan, A.: SPRNG: A Scalable Library for Pseudorandom Number Generation, *ACM Transactions on Mathematical Software*, Vol. 26, pp. 436–461 (2000)
- [McKim 01] McKim, R. and Mitchell, J.: *Design by Contract, by Example*, Addison-Wesley (2001)
- [Meyer 91] Meyer, B.: *Eiffel: The Language*, Prentice Hall Object-Oriented Series, Prentice Hall, NJ (1991)
- [Myers 11] Myers, G. J., Badgett, T., and Sandler, C.: *The Art of Software testing, third edition*, Wiley (2011), 邦訳は旧版『ソフトウェア・テストの技法第 2 版』（長尾 真 ほか（訳）、近代科学社, 2006）
- [Panzl 78] Panzl, D. J.: Automatic Software Test Drivers, *Computer*, Vol. 11, No. 4, pp. 44–50 (1978)
- [Rogers 01] Rogers, W. P.: J2SE 1.4 premieres Java's assertion capabilities, *JavaWorld* <http://www.javaworld.com/javaworld/jw-11-2001/jw-1109-assert.html> (2001)
- [Spinellis 05] Spinellis, D.: Version control systems, *IEEE Software*, Vol. 22, No. 5, pp. 108–109 (2005)
- [Teh 06a] Teh, Y. W.: A Bayesian Interpretation of Interpolated Kneser-Ney, Technical Report Technical Report TRA2/06, School of Computing, NUS (2006)
- [Teh 06b] Teh, Y. W., Jordan, M. I., Beal, M. J., and Blei, D. M.: Hierarchical Dirichlet Processes, *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 101, No. 476, pp. 1566–1581 (2006)
- [東京 92] 東京大学教養学部統計学教室（編）: 自然科学の統計学, 東京大学出版会 (1992)

〔担当委員：山川 宏〕

2011 年 7 月 1 日 受理

著 者 紹 介

牧野 貴樹 (正会員)

2002 年 東京大学 大学院理学系研究科 情報科学専攻 博士課程修了。博士 (理学)。2005 年–2011 年、東京大学 総括プロジェクト機構 領域創成/学術統合化プロジェクト研究部門 学術統合化プロジェクト (ヒト) 特任助教。2011 年より東京大学 生産技術研究所 最先端数理モデル連携研究センター 特任准教授。機械学習、コミュニケーション数理モデルの研究に従事。

合原 一幸

1982 年 東京大学 大学院工学系研究科 電子工学専攻 博士課程修了。工学博士。1993 年 東京大学 工学部 計数工学科 助教授。1998 年 東京大学 大学院工学系研究科 計数工学専攻 教授。1999 年 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻 教授。2003 年 東京大学 生産技術研究所 教授。