

令和 5 年 5 月 31 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K11860

研究課題名（和文）古典・量子統計モデルの普遍的な客観事前分布の理論構築

研究課題名（英文）Development of Universal Theory in Constructing Objective Priors in Classical and Quantum Statistical Models

研究代表者

田中 冬彦（Tanaka, Fuyuhiko）

大阪大学・全学教育推進機構・教授

研究者番号：90456161

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究の主眼である実ARMAモデルの客観事前分布の検討では、複素ARMAモデルの先行研究を適用するには、よい複素構造を見つける必要がある。そこで、時系列モデルに限らず実統計モデルについて、ケーラー構造の存在から優調和事前分布を検討する方法を提案した。また、客観事前分布に関する理論の量子統計モデルへの拡張では、純粋状態モデルの客観事前分布を提案した。関連して超伝導量子ビットのデータ解析での推定手法を新たに提案、理論的な性能保証を与えた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

情報幾何学では、通常、実多様体を考え、複素多様体を考えることは形式的な拡張に過ぎないことが多い。しかし、本研究では負の三項モデルという実統計モデル多様体を1次元複素多様体とみなして、優調和事前分布を導出できることを示した。これにより、客観ベイズ分析の理論研究における情報幾何の応用の新たな側面を開いた。

また、量子系での客観事前分布の提案は、複素射影空間上の施設配置問題を考えており、ORとベイズ統計、量子論を結びつける独創的な結果である。また、副産物として、最小エントロピーと呼ばれる量の特徴づけにも成功した。

研究成果の概要（英文）：In examining the objective prior distribution of real ARMA models, which is the main focus of this study, it is necessary to find a good complex structure in order to apply previous studies of complex ARMA models. Therefore, we proposed a method to examine super harmonic prior distributions for real statistical models, not only time series models, from the existence of the Kahler structure.

In the extension of the theory on objective prior distribution to quantum statistical models, we also proposed an objective prior distribution for pure state models. In a related work, we proposed a new estimation method for superconducting qubits in data analysis and gave a theoretical performance guarantee.

研究分野：統計科学

キーワード：情報幾何 ベイズ統計 量子情報 統計的決定理論 量子計算機 ゲートセットトモグラフィ 複素多様体 客観事前分布

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

一般にベイズ分析・ベイズ統計では、統計モデルに含まれるパラメータの事前分布 (prior) を設定する。しかし、パラメータ数に比べて、データ数が少ない場合は事前分布の選び方で大きく結果が異なることもあり、余計な情報を排除した事前分布 (以下、客観事前分布と呼ぶ。noninformative prior ともいう。)が必要とされる。特に統計モデルに含まれるパラメータ数が多く、かつ、動く範囲が複雑になる場合は、客観事前分布を設定する系統的な手法や決め方が必要になる。これはベイズ統計では古くから知られている未解決な問題である。

重要なのは、一義的な客観事前分布は存在せず、なんらかの自然な評価尺度や統計推測の問題設定の下で、よい客観事前分布を構成するという点である。

私はこれまでの駒木氏との共同研究において、ベイズ予測の観点から優れている、優調和事前分布を時系列モデルで提案してきた。例えば、自己回帰モデル (AR モデル) や移動平均モデル (MA モデル) では明示的に与えることができた。しかし、優調和事前分布をみつけることは、統計モデル多様体上で正の優調和関数を発見すること (微分幾何の問題) と等価であり、存在の有無や発見のための方法論は確立していない。そのため、応用上重要な ARMA モデルではいまだに不明である。そこで、

問題 A

『(特定の統計モデルの詳細な解析ではなく) 一般に、正の優調和関数が存在する統計モデル多様体の構造とはどのようなものなのか。』

といった問いが生じる。

一方、量子情報の分野では情報理論や数理統計の基礎的な結果を量子統計モデルに拡張する結果が多く得られてきた。形式的な拡張も意義はあるが、情報理論的な概念 (例: エントロピー) は量子統計モデルでは必ずしも適切ではないことを私は先行研究で指摘しており、量子特有の純粋状態モデルに限定して新たな概念に沿って客観事前分布を定める方法を提案した。また、実際の物理実験では測定に伴う古典雑音 (例: 電流の測定値の誤差) が不可避である。そこで、以下のような問いが生じる。

問題 B

『量子統計モデルへの拡張において、従来の情報理論的な概念を含む、より基礎的・普遍的な概念が存在するのか、また、そのような概念に基づいて説得的な客観事前分布を自然に導出できるのか』『そのような理論は実際の実験 (古典雑音が混じる) に適用可能か』

研究開始当初の背景と根本にある学術的な問題意識は以上である。

以降、量子統計モデルでないモデルを古典統計モデルともよぶことにする。

2. 研究の目的

(1) 古典統計モデルの客観事前分布

これまでの時系列モデルに関する客観事前分布の研究をさらにすすめ、正の優調和関数が存在する統計モデル多様体の構造を複素多様体との関係から明らかにする。優調和事前分布に限らず、何らかの意味で望ましい客観事前分布は他にもある。このような事前分布の存在条件と統計モデルの幾何学的な性質の関係を明らかにする。

(2) 量子統計モデルの客観事前分布

これまでの量子統計モデルに関する客観事前分布の研究をさらにすすめ、客観事前分布を定める、統一的・汎用的な指導原理を情報理論的な概念に依存せずに与える。

3. 研究の方法

(1) 古典統計モデルの客観事前分布

Choi and Mullhaupt による、形式的な時系列モデル、複素 ARFIMA モデルや複素 ARMA モデルでの優調和事前分布の導出を踏まえ、本研究では、実統計モデルとケーラー構造を関連付けて検討する。先行事例を整理して、正の優調和関数が存在する実統計モデル多様体の条件を複素多様体の言葉で明らかにする。

(2) 量子統計モデルの客観事前分布

私は純粋状態モデルというクラスの量子統計モデルで、既に客観事前分布を定義する新たな指導原理を提唱した。これは、従来の情報理論的な概念とは異なる視点に立っている。本研究では、これらの研究をさらに推し進める。また、共同研究として進めている、超伝導量子ビットの実験データの解析について、統計手法の理論的な性能保証などを行い、ベイズ統計的な応用の足掛かりを整える。

4. 研究成果

(1) 実統計モデル多様体上のケーラー構造を経由した優調和事前分布の検討

時系列モデルに限らず、複素化した統計モデルがケーラー多様体の構造を持つ場合、優調和事前分布の存在条件は平易な形にかけられる。しかし、その代償として、元々の確率過程に特殊な対称性を課すなど制約が多い。本研究では、偶数次元の実パラメータをもつ統計モデルについて、ケーラー構造の存在から優調和事前分布を検討する方法を提案した。実例としてとりあげた負の三項モデル多様体は 2 次元実多様体であるが、うまく複素座標系を導入することで 1 次元ケーラー多様体になる。そうすることで、きわめて見通し良く優調和事前分布を導出できた。

(2) カイ二乗ダイバージェンスを用いた客観事前分布の理論についての研究

Bernardo による reference 事前分布の拡張のひとつで、情報量を考える際に KL ダイバージェンスではなく、カイ二乗ダイバージェンスを通じて定義される事前分布が知られている。本研究では、この事前分布を定義する方程式を情報幾何学的に定式化した。その結果、 $\alpha=1/2$ の接続の下で平行な事前分布になっていることが示された。副産物として ARMA モデル上には、この事前分布が存在しないことも示された。

また、当初想定していなかったが、非正則性をもつ統計モデルの客観事前分布の研究にも着手した。足掛かりとして、片側切断指数型分布族 (OTEF) と呼ばれるクラスを念頭に、統計的漸近理論との整合性があうようにリーマン計量を定義し、情報幾何を構築した。正則モデルと類似の結果、非正則性に起因して異なる部分などが明らかになった。特に $\alpha=1$ の接続の下で平行な事前分布の存在を示すことができた。

(3) ガウス過程を用いた強化学習についての研究

研究提案当初は、時系列モデル (定常性を仮定したガウス過程) でのベイズ統計を想定していたが、近年は、機械学習への応用で一般的なガウス過程を考えることも多い。そこで、強化学習におけるガウス過程での客観事前分布の利用にも着目した。こちらは着手したばかりであり、基礎的な部分を定式化するという観点から、ガウス過程を用いた強化学習についてオンラインアップデート公式を導出した。今後は、客観事前分布の定め方について、より深く検討する。

(4) 超伝導量子ビットのデータ解析における正則化自己整合量子トモグラフィ(RSCQT)

超伝導量子ビットの実験におけるデータ解析(自己整合量子トモグラフィ)で、新たな推定手法を提案し、理論的な性能保証などを行った。従来までの物理学者中心の先行研究と違い、数理統計学的にしっかりした定式化を行い、自己整合量子トモグラフィにおいてこれまで曖昧だった推定量の一致性や収束のオーダーなどを明らかにした。特に、この文脈において導出した推定量は、ベイズ統計での MAP 推定量の近似と解釈でき、客観ベイズ分析の土台が構築された。関連して信用区間の構成法についても関係者と議論を継続している。

(5) 量子ベイズ統計の理論研究

量子情報に出てくる非正則モデルについては、reference 事前分布に相当するものについてベースとなる基礎理論も含めて提案した。その結果、施設配置問題という OR における数理的な問題と類似の構造を複素射影空間上で考えるという新たな基礎理論を構築できた。副産物として最小エントロピーの特徴づけも得られた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Sugiyama Takanori, Imori Shinpei, Tanaka Fuyuhiko	4. 巻 103
2. 論文標題 Self-consistent quantum tomography with regularization	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 1-21
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevA.103.062615	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Fuyuhiko	4. 巻 24
2. 論文標題 An Information Quantity in Pure State Models	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Entropy	6. 最初と最後の頁 541 ~ 541
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/e24040541	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Tanaka Fuyuhiko	4. 巻 9
2. 論文標題 Geometric properties of noninformative priors based on the chi-square divergence	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Frontiers in Applied Mathematics and Statistics	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3389/fams.2023.1141976	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kameda Kiseki, Tanaka Fuyuhiko	4. 巻 32
2. 論文標題 Reinforcement learning with Gaussian process regression using variational free energy	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Intelligent Systems	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1515/jisys-2022-0205	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 田中冬彦
2. 発表標題 カイ二乗ダイバージェンスに基づく無情報事前分布の情報幾何
3. 学会等名 2019年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中冬彦
2. 発表標題 負の三項モデル多様体のケーラー構造と優調和事前分布
3. 学会等名 2022年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉岡正記, 田中冬彦
2. 発表標題 片側切断指数型分布族のRiemann幾何学的性質
3. 学会等名 2022年度統計関連学会連合大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉岡正記, 田中冬彦
2. 発表標題 片側切断指数型分布族の情報幾何
3. 学会等名 RIMS研究集会 "種々の統計的モデルにおける推測方式の有効性"
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------