

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 31 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2012～2015

課題番号：24700273

研究課題名(和文) 時空間統計・量子統計における高次元モデルのベイズ予測理論

研究課題名(英文) Bayesian prediction theory to high-dimensional statistical models in spatial temporal statistics and quantum statistics

研究代表者

田中 冬彦 (TANAKA, FUYUHIKO)

大阪大学・基礎工学研究科・准教授

研究者番号：90456161

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,400,000円

研究成果の概要(和文)：量子系を記述する波動関数(純粋状態)を推定する問題においてベイズ推定の公式を導出した。無情報事前分布を用いて、最尤推定に基づく推定より一様に推定誤差を小さくできることを具体例で示した。また、ベイズ統計学、ひいては統計学全般で根本的な課題の一つである、無情報事前分布の選び方に関して、古典・量子を統一的に扱う定式化を行った。具体的には、測定や推定を制限した集合を定義し、その中でベイズ法とミニマックス法を結び付ける定理を示した。特に、正則条件の下、もっとも不利な事前分布の存在定理を証明した。

研究成果の概要(英文)：We derived an explicit form of Bayes estimate in the problem of estimating a wave function (a pure state) that describes the quantum system. We also give an example where Bayes estimate with respect to a noninformative prior gets uniformly smaller estimation error than that based on the maximum likelihood estimate.

In addition, we proposed a new formulation where we consider the choice of a noninformative prior, which is a fundamental issue not only in Bayesian statistics but also in traditional statistics. It includes both classical and quantum statistics. We introduce a restricted class of (physical!) measurements and estimates and among them we show minimax theorem connecting Bayes methods with minimax methods. Under regularity conditions, we show the existence of least favorable priors.

研究分野：統計理論

キーワード：統計数学 数理工学 量子コンピュータ 情報工学 応用数学 ベイズ統計 無情報事前分布 統計的
決定理論

1. 研究開始当初の背景

現代の統計学では、多くのパラメータが入った複雑な統計モデルがしばしば出てくる。時空間統計での統計モデルや量子物理実験における巨大な密度行列(量子統計モデル)などがそうである。

このようなモデルでは、パラメータ数に比してサンプルサイズが少なく、単純な最尤推定法では推定した値が不安定になることも多い。そのため、パラメータに事前分布を導入するベイズ的なアプローチが行われている。

一方で、ベイズ統計学では事前分布の選び方で結果が異なるため、パラメータに関して事前の情報がない時の分布(無情報事前分布)の選び方の指針が必要である。これは一見すると、ベイズ統計学の理論的な課題に見えるがそうではない。実のところ、従来の統計学での最尤法は小標本の場合、理論的な正当性を失うし、特定の統計モデルでのみ使える方法しか提案できていない。つまり、統計学全般にわたる未解決問題といえる。

ベイズ統計学の理論研究では、主に独立同一性を仮定して無情報事前分布がいくつか提案されていた。そこで、無情報事前分布に関する理論研究として、研究当初は、2つの方向性が考えられた。1つは提案された無情報事前分布が応用上、有用であるかどうか、もう1つは独立同一性を外した条件下での拡張である。本研究では後者について取り組むこととした。

研究当初は一般理論は難しいように思われたため、かなり特定の時系列モデル、および量子統計モデルで、解析的な扱いが比較的可能な例について検討することを想定していた。

2. 研究の目的

提案者は、時系列モデルでは自己回帰モデル(ARモデル)、自己回帰移動平均モデル(ARMAモデル)などで無情報事前分布の選び方の理論的な提案を行ってきた。特にARモデルではジェフリーズ事前分布よりも優れた事前分布が提案できた。また、量子統計モデルでは、相互情報量とは全く異なる観点から、ゲーム論的な無情報事前分布を提案してきた。本研究の当初の目的は、こうした提案者の一連の研究結果をさらに推し進めることである。

独立性を外したモデルでの一般論は非常に難しいため制限されたクラスの統計モデルであってもベイズ統計の発展に大きく寄与しうる。

また、個別の議論ではなく、最終的には、統一的な観点での指導原理・無情報事前分布に関するアプローチを提案することも目指す。

3. 研究の方法

2でも触れたように、当初は、独立同一性を仮定しない統計モデルとして、時系列モデルや量子統計モデルについて、まず、個別の分析を行うことを想定していた。有用かつ、比較的、解析的に扱いやすい統計モデルがそれぞれ知られており、それらについて、無情報事前分布の先行研究などとの比較や新たな提案を考えていた。4の成果(1)は、そのような文脈での成果である。

しかし、その後、想定していなかった知見をいくつか得ることができ、大きく方針をかね関数解析的な手法を用いて一気に一般理論を構築する方向にシフトした。そこで、以下では実際の研究方法について述べる。

基本的には、Tanaka (2012)にあるような、統計的決定理論におけるゲーム論的な枠組みでの、もっとも不利な事前分布の定義を行う。この方針自体はBernardo (1979), Komaki (2011)などの先行研究とも合致する。また、このように定義された、もっとも不利な事前分布が、応用上、有効であることを示すため、関数解析を用いた存在証明とミニマックス型の定理の証明を行う。

これら一連の定式化において、特に、古典統計の多くのモデルも含むような理論体系にする必要がある。そのため、従来、量子情報科学の分野によく見られるような、ヒルベルト空間の有限次元の仮定をはずし、一般のヒルベルト空間で関数解析的に厳密に取り扱うこととした。既存結果として次の2つの理論を導入し本目的に沿って統合した。

1. Holevo が 1970 年代に提唱した、一般のヒルベルト空間上の量子統計モデルや量子統計的決定理論(Holevo, 1978)
2. LeCam らによる古典統計モデルにおける、もっとも不利な事前分布に関する諸結果(Strasser, 1985)

その上で古典・量子を同じ定式化の中で統一的に議論するための理論基盤の構築を行う。

参考:

- Bernardo, J.M.: Reference posterior distributions for Bayesian inference (with discussion). *J. R. Statist. Soc. B*, 41 (1979), 113-147.
- Holevo, A.S.: Investigations in the general theory of statistical decisions. *Proc. Steklov Inst. Math.* 35, 124 (1976) (In Russian), AMS Transl. (1978).
- Komaki, F.: Bayesian predictive densities based on latent information priors. *J. Statist. Plan. Inf.* 141(2011), 3705-3715.

Strasser, H.: *Mathematical Theory of Statistics*, (De Gruyter, Berlin 1985) 240-242.

Tanaka, F.: Noninformative prior in the quantum statistical model of pure states. *Phys. Rev. A*, 85(2012), 062305.

4. 研究成果

(1) 波動関数のベイズ推定

ベイズ予測の観点を量子統計モデルに拡張する場合、「予測」の解釈から、量子系を記述する波動関数を推定する問題を考えることが可能である。また、その際に、損失関数はダイバージェンスではなく、波動関数の内積に基づく量が自然である。こうした問題設定で、波動関数のベイズ推定の公式を導出した。特に、従来は、波動関数を有限データから推定する場合、適当な基底関数で展開した後、展開係数を有限次で打ち切って推定するが、パラメトリックモデルを仮定して推定する方法を提案した。具体例でパラメータの最尤推定に基づく推定よりも、一様に推定誤差を小さくできることを示した。

(2) 量子ミニマックス定理

本研究では、Holevo らの提唱した量子統計的決定理論の枠組みで、古典統計におけるWald, LeCam によるミニマックス型の定理を拡張して証明した。定理自体は、パラメータ空間と決定空間のコンパクト性、および連続な損失関数であれば、どのような設定でも成立する。また、損失関数は下半連続性まで条件を緩めることが可能であり、これにより、Kullback-Leibler ダイバージェンスの量子版である、量子相対エントロピーを含めてよい。また、ここでのミニマックス型の定理とは、ベイズ統計におけるベイズ推定とミニマックス推定を結び付ける定理をさす。(いわゆる関数解析におけるミニマックス定理とは異なる。) この定理に付随するいくつかの結果を述べる。

①基本的な存在定理

詳細な説明は省くが、量子統計的決定理論の枠組みでは、統計学におけるベイズ推定やミニマックス推定は、ベイズ測定やミニマックス測定という言葉に置き換わる。前者は、データからの推測方式をさし、後者は、物理系に対して、どのような測定を行ってデータを収集するか、及び、収集した後のデータからの推測方式の二つをまとめた概念である。事前分布が与えられた下でのベイズ測定の存在、ミニマックス測定の存在証明自体は、それぞれ、本定理よりも緩い条件で示せる。これらは1980年代にすでに知られていたが、

量子力学の原理的な興味に沿った研究であった。本研究の主眼はベイズ統計学における無情報事前分布の基礎理論であり、次の重要な成果が得られた。

(正則条件を満たす統計モデルに対し) 連続な損失関数を仮定した下で、もっとも不利な事前分布が存在する。

また、連続ではない下半連続な損失関数を用いる場合、ミニマックス型の定理は成立するが、このような事前分布の存在は保障されない。本研究ではそのような例も与えた。

ただし、Kullback-Leibler ダイバージェンスの場合、連続ではないが個別に存在証明が可能である(Komaki, 2011)。また、離散的な場合、かつ、量子状態識別という特定の統計推測の問題で、厳密性を欠く議論がなされている。

量子情報科学では、対称性を仮定した統計モデルを取り扱うことも多く、その場合は、対称性に立脚した群不変測度を用いてベイズ測定とミニマックス測定を結び付けることも可能である(量子 Hunt-Stein 定理)。ただし、応用上、対称性が崩れる統計モデル(例えば、量子プロセストモグラフィなど)はいくらでもあり、従来は、無情報事前分布に関する理論提案が皆無の状態であったが、本研究成果は、新たな提案のための理論基盤にすることが期待される。

②ミニマックス測定とベイズ測定の関係

損失関数が下半連続であっても、もっとも不利な事前分布が存在する場合には、この事前分布を利用して構成するベイズ測定のうち、少なくとも一つは、ミニマックス測定を与えることが示される。通常、事前分布を一つ定めると、ベイズ測定は唯一つ存在することが多いため、もっとも不利な事前分布を用いてベイズ測定を求めれば、同時にミニマックス測定にもなる。

ミニマックス測定自体は、古典統計のミニマックス推定と同様に事前分布に関係なく定義される概念であるから説得性が高い。

③古典・量子を統一的に扱うための新たな概念の導入

量子統計的決定理論では、量子論に抵触しない範囲で、原理的な推定誤差の下限を明らかにするという方向での理論研究が先行していた。そのため先行研究でのベイズ測定やミニマックス測定は、実際上、実験不可能な測定装置でデータを収集して推定すれば、ここまで推定誤差を小さくできるという考え方になっている。つまり、応用上の意義はほぼ皆無であった。

一方、実際の実験では、量子状態(有限次

元の複素数の行列で記述される)を推定するような問題(いわゆる量子トモグラフィ)を考える際は、古典統計の手法を利用している。

本研究では、理論と実際の実験での応用がすべて同じ土俵で記述されるべきであると考え、測定の構成的な閉凸集合という概念を新たに導入した。実は①②で述べた結果は、測定の構成的な閉凸集合に制限してもすべて成立する。そのため、実際の実験で可能な推定や測定で最良のもの、および推定誤差の平均の下限を数値的に議論することが可能になった。

このような定式化は、従来にはなかった発想であり、かつ、無情報事前分布の存在定理と合わせて、実際の量子物理実験への応用が期待される。

5. 主な発表論文等 (研究代表者には下線)

[雑誌論文] (計 5 件)

査読あり

[1] TANAKA Fuyuhiko,
"Bayesian estimation of the wave function",
Physics Letters A, Elsevier, Vol.376,
2471-2476, 2012.

<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2012.06.026>

[学会発表] (計 18 件)

[1] TANAKA Fuyuhiko,
"How to construct the optimal Bayesian measurement in quantum statistical decision theory", APS March meeting, Baltimore(USA), March 14, 2016.

[2] 田中冬彦,
"量子統計: 実験技術の進歩にともなうニーズの変遷と新たな課題", 第9回日本統計学会春季集会, 明治大学中野キャンパス(東京都中野区), 2015年3月8日.

[3] TANAKA Fuyuhiko,
"Bayesian predictive method in quantum physics", ims-APRM2012, Epochal Tsukuba(Tsukuba, Ibaraki), JAPAN, July 4, 2012.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

田中 冬彦 (TANAKA Fuyuhiko)

大阪大学・大学院基礎工学研究科・准教授
研究者番号: 90456161