

RIMS & 文部省WS
「高次元量子トモグラフィにおける
統計理論的なアプローチ」@京都

ftanaka@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

**圧縮センシングの
高次元量子トモグラフィへの応用**

2013年10月30日
初版

田中冬彦(Tanaka Fuyuhiko)

所属：大阪大学 大学院基礎工学研究科

発表の流れ

第一部：
研究集会のオーガナイザーとして

第二部：
量子トモグラフィの概略
～統計研究者向け

第三部：
高次元量子トモグラフィに対する統計的課題

第四部：
圧縮センシングの量子トモグラフィへの応用

第五部：
量子トモグラフィの課題解決に向けた異分野間協働の世界的な動向

研究録用に1,2日目の講演を再編集した内容です
白黒印刷のため見づらくなりますがご容赦ください

**第一部
研究集会のオーガナイザーとして**

本研究集会の経緯

JST数学領域の紹介

科学技術振興機構(JST)

「数学と隣分野との協働によるブレークスルーの探索」領域

(さきがけ:個人研究; CREST:チーム型研究)



協働



さきがけ研究課題(代表:田中冬彦)

統計モデル多様体の普遍的な性質のベイズ予測理論への応用
(2012年3月終了)



協働



Q-stats

Q-stats (2010.04-)

量子系の統計的推測の研究に興味のある、理論物理、実験物理の若手中心のメーリングリストおよび研究交流の組織

現状と目標

- ・統計理論と理論物理:数学が中心の組織
- ・理論物理・実験物理への統計学の啓蒙
- ・個人レベルの協働というより、いつでも協働できる土壌づくり



財政基盤がないので有志の熱意で運営(参加者募集中!)

Q-stats有志が企画してきた集会

「連携」と叫ぶのは簡単、でも実行は難しい

→ まずは交流の場を提供する所から!

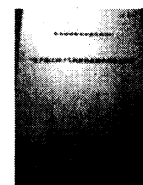
	統計・情報 (数学)	物理 (理論)	物理 (実験)
2011年秋:統計学会(初の量子統計セッション)	●	●	
2012年春:物理学会(統計チュートリアル)		●	●
2012年秋:統計学会(企画セッション)	●	●	
2012年秋:物理学会(実験チュートリアル)		●	●
・産学での統計解析に焦点			
2012年数理研 共同研究集会	●	●	●

※1 便宜上、主な参加者、聴講者を3分野に分欄

Q-statsの活動の成果

数理解析研究所講究録1834

「量子論における統計的推測の理論と応用」



ポイント

- ・数値統計、量子物理(理論)、量子物理(実験)の専門的研究が同時に掲載された貴重な一冊!
- ・数学と隣分野の連携を目指す人にも多岐にわたる一冊!
- ・各章が数冊での引用にも便利な一冊!
- ・和風スイングについて書いた序文もついた特快一冊!
- ・序文では、当時の研究費の体制の難点についても指摘!

(←今年度は特別分冊「産学連携数理研」ができた)



今年も講究録作成にご協力をお願いします!

異分野連携WSでの注意点

James et al での指摘

F. James et al.: *Statistical Methods in Experimental Physics*
(初版 1971年: 統計家1人+高エネ物理4人)

1.2節で統計学と物理学(素粒子実験)で同じ用語が
違う意味で使われていることを指摘

Physicists say	Statisticians say
Determine	Estimate
Estimate	Guess

明文化されてない様々な「違い」は気をつける必要がある

※昨年の調査録(1834)序文も参照

異分野間連携WSでのポイント(一般論)

発表する側

- ・数学的な定義 → ポイントをおさえる(直観的な意味や具体例)
- ・自分の分野の、記法・背景・価値観など「常識」にも触れる
- ・論理的な構成

聴く側

- ・原点に立ち返った質問もすべき (Why型、なぜ、そういうのを考える?)

連携は人間同士が行う

- ・対等な立場、相手と相手の分野を尊重
- ・偉い先生が權威をふりかざさない(リーダーシップはOK)
- ・価値観や背景の違いを楽しむ余裕をもつ

※昨年の調査録(1834)序文も参照

量子統計の研究集会としての注意点

「統計学」の再確認

統計学とは？

手元に得られたデータ(観測値)から、そのデータを発生させている源に関して推測する手法を系統的に扱う学問

ただし、データの発生は決定論的ではなくて何らかのランダムな要素が入る

- 1) もちろん、数学的なモデルを構築して解析するに当たっては否定
- 2) 厳密には上は「推測統計学」の範疇

本集会での「量子統計」の定義を確認

用語のコンセンサス

量子系の統計的推測＝量子統計

有限データ(観測値)に基いた、データの発生源(量子論が無視できない系)に関する推測

1. データの発生は決定論的ではなくて何らかのランダム(量子論含む)な要素が入る。
2. データの取得方法(測定方法)も考える

チェック項目

1. 統計力学との違い
2. Holevoによる定式化との違い
3. 量子情報理論との違い

詳しくは昨年の講義録(1834) p.13 あたりを参照

量子統計の二つのアプローチ

トップダウン的

- ・数学的に許される最適な測定を探す
- ・古典統計の結果がどのように拡張されるか
- ・量子情報、暗号などの理論的な結果に関連

従来はこの研究に重点

ボトムアップ的

- ・測定は固定もしくは実現可能なクラス
- ・量子トモグラフィなど実験データの統計解析手法
- ・実験サイドのニーズに応じた研究

今年は下側にフォーカス(来年は上側)

本研究集会の構成

1. 課題の共有 (FT)

(物理を専門としない)統計研究者向けに高次元量子トモグラフィでの統計的課題を説明

2. ひとつの解決案の紹介 (FT)

・Gross *et al.*による圧縮センシングを量子トモグラフィに適用した結果

3. 以上を念頭に圧縮センシング、スパース推定の研究紹介

・統計の若手研究者による異分野向けチュートリアル的講演(各自の研究宣伝もOK)

・1, 2を踏まえた活発な議論(改善点、別の解決案 etc.)

参考: 統計の感覚とのギャップ?

物理サイドでよくきく話

量子統計の理論的な成果
($\circ\circ$ の下限を達成する測定方法, etc.)

→ 理論結果を検証/実証するために物理実験を行う

統計サイド(異なる文化圏)からのコメント

1. 実験で「使う」のが統計なんじゃないの?
2. 上の実験での推定誤差が理論値と大きく食い違う場合、それは一体何を意味するのか?



物理の方は解答(反論)を考えてみてください

最後に

量子統計の若手に向けて (1/2)

深い理論

- 必ずしも「深い理論の追求」から出てくるわけではない!
(課題解決という動機づけですらない)

例:

・前期量子論

- プランクによる「黒箱の隅をつつくような仕事」が重要な貢献!
(彼の仕事は、データを説明する統計モデルをつくる作業に極めて近い)

・圧縮センシング

- (画像解析で)よくわからないがうまくいっている手法
- それらを説明するために数学的な手法を駆使
- 豊かな分野の創成!

量子統計の若手に向けて (2/2)

新しい分野、フロンティアの開拓

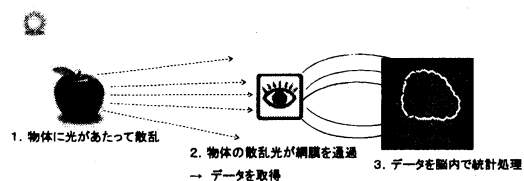
1. 思うように進まないのは当たり前!
2. 萌芽的な研究はしょぼく見える、ひるむな
(数学は批判にさらされて創られていく)
3. 「失敗」も研究を前進させる貴重な情報

量子統計の研究集会の方針

- ・様々な観点からの研究; 試みを受け入れる
of. 山中教授のiPS細胞の経緯
- ・数学、物理学、統計学といった多様な価値観を認める
- ・新規参入者の挑戦を歓迎
(→ 参入者が増えてきたらQuality維持の方策を打つ)

第二部 量子トモグラフィの概略 ～統計研究者向け

「見る」ということ

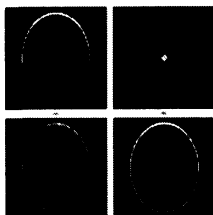


対象に光をあてて散乱光によるデータの処理を通じて見ている

医療におけるトモグラフィ

以下はテスト画像(Candes et al (2006)より抜粋)

- (a) オリジナルの画像(人体の断面図に相当;
直接見えない)
- (c) 散乱光を解析して単純な方法で復元したもの
- (d) 散乱光を解析して, ある種の最適化で復元したもの(後で説明)



散乱光のデータを「変換」して, 間接的に見ている!

量子トモグラフィ (1/3)

1. 「見よう」としているもの

→ ミクロの世界: 原子や分子、光の状態

「状態」を特徴づける複素行列 を知りたい!

→ 密度行列 とよばれる

密度行列=以下の条件をみたす複素数を成分にもつ行列

$$\text{Tr } \rho = 1, \rho \geq 0$$

例: 2単位系, 1モードの光などを表す密度行列

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix}$$

x, y, z は実数のパラメータ(これを実験的に決める)

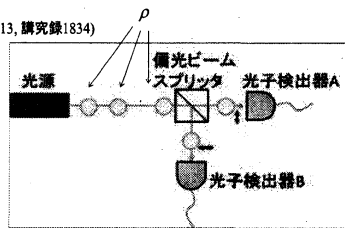
量子トモグラフィ (2/3)

2. 測定によって得られるデータ

光学系の場合→ 光子の数

測定方法: 測定したい物理量に応じた「フィルタ」を利用して出てくる光子の数をカウント

偏光方向の測定: 岡本 (2013, 講義録1834)



量子トモグラフィ (3/3)

3. データからの推定

*簡単のため, 1パラメータモデルの例

θ は光の「偏光」の角度に対応

$$\rho_\theta = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & 1 - \cos \theta \end{pmatrix}$$

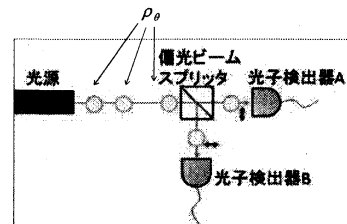
光学系の場合:

一定時間、実験を行って
A,Bでの光子数をカウント
その総数を N と書くとき,

$$N_A \sim \text{Bin}(N, \cos^2 \theta)$$

$$N_B = N - N_A$$

が成立.



偏光方向の測定: 岡本 (2013, 講義録1834)

2パラメータの場合 (1/3)

1. 「見たいもの」=2次元の密度行列

2パラメータモデル

光の「純粋さ」が落ちると, それに対応するパラメータ r が入る

$$\rho_{r,\theta} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + r \cos \theta & r \sin \theta \\ r \sin \theta & 1 - r \cos \theta \end{pmatrix}$$

一般論を説明するため, パラメータを x, z で書き直すと,

$$\rho_{x,z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + z & x \\ x & 1 - z \end{pmatrix} \quad 0 \leq x^2 + z^2 \leq 1$$

2パラメータの場合 (2/3)

2. 測定によって得られるデータ

2パラメータモデル

$$\rho_{x,z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + z & x \\ x & 1 - z \end{pmatrix} \quad 0 \leq x^2 + z^2 \leq 1$$

先ほどと同じ測定の場合,

$$N_A \sim \text{Bin}\left(N, \frac{1+z}{2}\right) \quad N_B = N - N_A$$

パラメータ x は上の測定からは決めることができない

そこで, 別の測定を準備すると...

$$M_A \sim \text{Bin}\left(M, \frac{1+x}{2}\right)$$

2パラメータの場合 (3/3)

3. データからの推定

2パラメータモデル

$$\rho_{x,z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x \\ x & 1-z \end{pmatrix} \quad 0 \leq x^2 + z^2 \leq 1$$

$$N_A \sim \text{Bin}\left(N, \frac{1+z}{2}\right) \quad M_A \sim \text{Bin}\left(M, \frac{1+x}{2}\right)$$

線形推定量: (単純な方法)

$$\hat{z} = 2 \frac{N_A}{N} - 1, \hat{x} = 2 \frac{M_A}{M} - 1$$


 以上をもっと一般的に記述しておく

測定と期待値パラメータ

測定と期待値パラメータ

先の例で $N=1$ として (コイン1枚投げ)光子がAで検出(表) $\rightarrow +1$ 光子がBで検出(裏) $\rightarrow -1$ $z_1, z_2, \dots, z_n$ のように書くこれらは独立同一分布に従う確率変数 (Z とかく) であって

$$\frac{z_1 + z_2 + \dots + z_n}{n} \rightarrow E[Z] = z$$

理論的には

密度行列の任意の線形なパラメータ θ には、適当な測定が存在して、そのデータを W (確率変数) とあらわすことにすると、

$$W \sim P(w | \theta, \xi),$$

$$E_{\theta, \xi}[W] = \theta \quad \forall \theta, \xi$$

 ξ は密度行列の他のパラメータ

Observable (1/3)

密度行列の基底による展開

密度行列の線形なパラメータは、Hermite行列の「直交」基底を用いて書くべし

$$\rho_\theta = \sum_j \theta^j X_j$$

Hermite行列の空間と標準内積

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr} AB$$

Hermite行列の正規直交基底を用いると

$$\theta^j = \langle \rho, X_j \rangle = \text{Tr} \rho X_j$$

Observable (2/3)

 $d=2$ の例

$$\begin{aligned} \rho_{x,y,z} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (I + zX_3 + yX_2 + xX_1) \\ &= \frac{1}{2} (I + \theta^1 X_1 + \theta^2 X_2 + \theta^3 X_3) \end{aligned}$$

$$X_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad X_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\langle X_i, X_j \rangle = \text{Tr} X_i X_j = 2\delta_{ij} \quad \text{※必ずしも正規にはならない(警告)}$$

$$\theta^j = \langle \rho, X_j \rangle = \text{Tr} \rho X_j$$

Observable (3/3)

再掲

密度行列の任意の線形なパラメータ θ には、適当な測定が存在して、そのデータを 100 確率変数とあらわすことになると、

$$W \sim P(w|\theta, \xi),$$

$$E_{\theta, \xi}[W] = \theta \quad \forall \theta, \xi \quad \xi \text{ は密度行列の他のパラメータ}$$

一方、任意の線形なパラメータ θ には、適当な Hermite 行列 X が存在して内積を用いてかける。

$$\theta' = \langle \rho, X_I \rangle = \text{Tr} \rho X_I$$

ある測定から期待値
パラメータとして推定

見たいけど直接みれない

「ある測定」に対して、Hermite 行列が対応

上の関係を利用して測定データの期待値と Hermite 行列が対応付けられる。そのため Hermite 行列 X を Observable とよび、 X を測定するなどともいう。

(本来は背後に物理的な測定のセットアップがあった。)

参考: 周波数サンプリング

信号処理などでも、しばしば周波数成分が測定されて、そこから元の信号を復元することを行っている。

$$f(x) = \sum_j c_j e^{-i\omega_j x} \quad \text{元の信号}$$

$$c_j = \langle f, e_j \rangle = \int \overline{f(x)} e_j(x) dx$$

ある周波数成分

見たいもの

ある周波数に対応した、標準の波
 $e_j(x) = e^{-i\omega_j x}$

$$\theta' = \langle \rho, X_I \rangle = \text{Tr} \rho X_I$$

ある測定から期待値
パラメータとして推定

見たいけど直接みれない

「ある測定」に対して、Hermite 行列が対応

まとめ: 量子トモグラフィ

量子トモグラフィ

実験データから量子系を特徴づける密度行列を推定する作業

※光に限らず、量子論で記述できればなんでもOK

様々な量子物理実験で使用

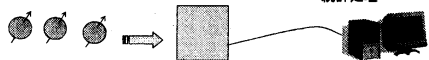
例: 量子光学、量子制御、量子暗号、量子計算、量子情報通信 etc.

1. 統計モデル(密度行列の族)を指定

$(\rho_1, \rho_2, \dots)$

2. 適切に選ばれた複数の測定装置

3. 測定データから統計処理



量子状態トモグラフィの概要図

参考: 連続系の量子トモグラフィ

cf) 連続系の量子トモグラフィ

1. 「見よう」としているもの

→ 特定波長のレーザー光の状態すべて

密度行列は無次元!

⇒ Wigner関数表示で、光の状態を「見る」 $\rho \leftrightarrow W(x, p)$ Wigner関数 $W(x, p)$: 平面上の実関数

- ・古典的な光: (電場の大きさ, 磁場の大きさ)の同時確率分布と解釈可能
- ・量子的な光: Wigner関数が平面上で負の値をとる!

→ 同時確率分布として解釈はできない!
しかし1次元空間への「射影」は常に確率分布に対応Wigner関数の例: Artiles *et al.* (JRSS B, 2005)

cf) 連続系の量子トモグラフィ

2. 実験に観測されるもの

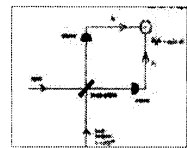
測定データ: 2つの検出器からの「電流」の差

連続値とみなしており、データも十分とれるため、ノンパラメトリック推定に近い

local oscillator 部分のパラメータ (複素数 z) の調整で、データの確率分布が変化。

確率分布の族をすべてヒストグラムで近似して推定

→ 逆ラドン変換で、Wigner関数の推定を行う

ただし、パラメータ z も十分、細かくとる(ランダム、もしくは一定角度ずつ回すなど)→ このあたりの統計手法と一致性を議論したのが Artiles *et al.* の結果。光のトモグラフィの測定セットアップ: Artiles *et al.* (JRSS B, 2005)量子トモグラフィに対する
統計的手法の変遷

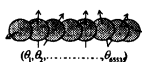
量子(状態)トモグラフィ

昔

少数のパラメータに比べて大量のデータがとれるため、
データ平均で十分良い推定

$$\theta = E_{\rho}[W] \approx \frac{w_1 + w_2 + \dots + w_N}{N}$$

現在



1. 規模が大きな系(パラメータ数も大量:ビッグデータ)
2. データ処理も含めうまくて良い推定手法が必要

$$E_{\rho}[W] \approx \frac{w_1 + w_2 + \dots + w_N}{N}$$

量子トモグラフィにおける統計手法

既存結果

- a) 線形推定量 (平均)
- b) 最尤推定量 (Hradil, 1997)
- c) (適当な事前分布を仮定した) ベイズ推定
 - 数値実験でデータ数小だとベイズ推定が良い (Buzek *et al.*, 1998); 理論的にベストであることの証明 (T and Komaki, 2005)
 - ※ ($p > 0$ の仮定の場合) Essentially complete class theorem を証明
 - 望ましい事前分布 (Quantum Latent Prior) を選んでベイズ推定すれば十分 (FT, 2013@Toronto etc. & 投稿中)
 - QLPは数値的に求めるのがめんどう (cf) Reference prior と同様.)

a), b) の違いを先ほどの例で説明

例: 2パラメータの場合

2パラメータモデル (再掲)

$$\rho_{x,z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x \\ x & 1-z \end{pmatrix} \quad 0 \leq x^2 + z^2 \leq 1$$

$$N_A \sim \text{Bin}\left(N, \frac{1+z}{2}\right) \quad M_A \sim \text{Bin}\left(M, \frac{1+x}{2}\right)$$

a) 線形推定量

$$\hat{z} = 2 \frac{N_A}{N} - 1, \hat{x} = 2 \frac{M_A}{M} - 1$$

→ しかし、データ数が少ないと、密度行列の制約が無視できない

b) 単純な最尤推定量 (cf) Hradil は Choleski 分解を利用

$$l(z, x) = \binom{N}{N_A} \binom{M}{M_A} \left(\frac{1+z}{2}\right)^{N_A} \left(\frac{1-z}{2}\right)^{N-N_A} \left(\frac{1+x}{2}\right)^{M_A} \left(\frac{1-x}{2}\right)^{M-M_A}$$

→ 上の尤度関数を $0 \leq x^2 + z^2 \leq 1$ の範囲で最大化

第三部

高次元量子トモグラフィに対する統計的課題

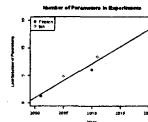
量子情報実験の大規模化

Haffner *et al.* (2005)



- $2^{16} \approx 10^{4.8}$ 個のパラメータを最尤推定 (計算時間がボトルネック)
- 「想定通りの密度行列」が実現できているかを確認
- 約6500種類の測定で、それぞれデータ数は100

パラメータ数は指数増加



行列の各成分を精度よく推定するのは無理

→ 柔軟なモデリング & ベイズ的な手法も有効!

密度行列の次元とパラメータ数

合成系の記述(1/2)

複素ベクトル空間のテンソル積

V_A, V_B 複素ベクトル空間
 $\longrightarrow V_A \otimes V_B$ テンソル積空間

テンソル積の例

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \in V_A \longrightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_1 b_3 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \\ a_2 b_3 \end{pmatrix} \in V_A \otimes V_B$$

合成系の記述(2/2)

量子力学の公理

系1 V_1 系2 V_2

ひとまとめた系(合成系)はテンソル積空間 $V_1 \otimes V_2$ の密度行列で記述される。

例: 2次元の系が, k 個集まった場合 (e.g. k 個の光子をひとまとめたとき)

$$(C^2)^{\otimes k} := C^2 \otimes \dots \otimes C^2 = C^{2^k}$$

独立なObservableの数 (Hermite 行列の実線形空間としての次元) $= 2^{2k} = 4^k$

合成系のObservable

$d=2, k=1$ の例

$$\rho = \frac{1}{2} (I + \theta^1 X_1 + \theta^2 X_2 + \theta^3 X_3)$$

$$X_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad X_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$d=2, k$ の例

$$X_{\alpha_1, \dots, \alpha_k} := X_{\alpha_1} \otimes X_{\alpha_2} \otimes \dots \otimes X_{\alpha_k} \quad \alpha_j = 0, 1, 2, 3$$

がHermite行列の直交基底となっている。

$$\rho = \sum_{\alpha} \theta^{\alpha} X_{\alpha}$$

$(C^2)^{\otimes k}$ 次元の行列

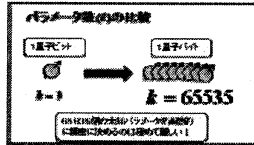
量子情報実験もビッグデータ時代へ

量子ビット(Qubit)から量子バイト(Qubyte)へ

量子ビット C^2 で記述 (量子ビットは量子計算の単位素子)

量子バイト $(C^2)^{64}$ で記述

(密度行列の実パラメータの数) = (次元) $^2 - 1$



※13年度文部省「量子・数値科学と数科学」連携との連携研究ワークショップ(読者書より抜粋)

単純にすべての未知パラメータを推定するのは不可能

→ 「うまい工夫」が必要

低ランク性を利用

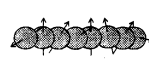
Gross et al (PRL, 2009)

密度行列の次元は大きい、行列のランクが十分小さいこと(低ランク性)が分かっている場合

→ 圧縮センシング (Compressive Sensing)の「行列版」を考えて、トモグラフィを行うことを提案(第四部で説明)

実際, Haffner et al (2005) の実験での密度行列は成分のほとんどは0!

→ 低ランク行列とみなせる



— 密度行列の成分の絶対値(絶対値)を縦軸にプロット

量子トモグラフィ:ひとつのビジョン

基盤技術としての量子トモグラフィ

統計 & 物理の協働によって取り組みたい研究課題

高次元トモグラフィで安価で高速な密度行列の推定

1. 厳密・精密な実験ではなく、試行錯誤的な実験で使うことを想定
例: 装置の調整パラメータを変化させた時にミクロの状態がどう変化するかをリアルタイムでチェック
2. 精度は落ちるので法則の発見や検証実験には向いてない

理論として要求されるもの

1. 大雑把でも密度行列の推定量が高速で計算できた方がいい
(→ その一つがスパース推定, etc.)
2. 理論的に最適な測定や高精度の追及とは別の方向性!

何故、今がチャンスなのか？

従来の方向性

理論的にベストな測定や高精度の追及； 原理的な側面

理論家はこちらを重視 & 今後も同様（「理学」の発想！）

今回の方向性

大雑把でも推定量が高速で計算できた方がいい； 実用的な側面

多くの統計研究者はむしろこっち（「工学」の発想！）

今が連携のチャンス！

1. 海外にQ-statsのような組織・活動はなく、統計と物理との協働は難しい&もしくは想定外（後述）
2. 統計研究者が参加しやすい課題設定！

cf: 生命科学の次世代シーケンサ

従来型シーケンサ

ゲノム情報を解読して終了！ そのための道具
だから、高速化より正確さを重視

次世代型シーケンサ

従来型に比べ安価で高速に塩基配列を解読

→ 生命科学実験の新たなパラダイム！



外観で見た次世代シーケンサ（図説生命科学ページ164）

日本は？

- ・ビジョンがなく、次世代シーケンサの技術開発皆無（米国から高額機器を購入）
- ・出力される大量データの統計解析ができない（バイオインフォマティクスの人材が圧倒的に不足）



基盤技術は侮れない！

第四部 圧縮センシングの 量子トモグラフィへの応用

第四部の目的

ここでの目的

最新の統計手法のひとつが量子トモグラフィに应用されていることを統計サイド、物理サイドの両方に向けて紹介
& 他の講演を聴く上での参考

注意点

1. オリジナルな研究紹介ではない
2. 論文紹介でもない（テクニカルな話はまだフォローできてない）
→ 確率を上から1でおさえるとか？！
3. ひとつの方向性を示唆

量子トモグラフィの 線形モデルによる記述

測定 (再掲)

再掲

密度行列を特徴づける線形なパラメータに番号をつけておく.

$$\rho \leftrightarrow (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_m)$$

この時, 各パラメータに対応してHermite行列 X (Observable) たちが存在

$$\theta_j = \langle \rho, X_j \rangle$$

各々の測定に対して, そのデータを W (確率変数) とあらわすことにすると,

$$W_j \sim P(w_j | \theta),$$

$$E_\theta[W_j] = \theta_j$$

そこで, 観測データと期待値/パラメータの差を, 誤差 (確率変数) として表すと,

$$w_j = \theta_j + \varepsilon_j = \langle \rho, X_j \rangle + \varepsilon_j$$

量子トモグラフィの線形モデル化

線形モデル化

以上をまとめると, 量子論に起因する「誤差」に基づく線形モデルができる

$$w_j = \theta_j + \varepsilon_j = \langle \rho, X_j \rangle + \varepsilon_j$$

誤差の確率分布は,

$$E_\theta[\varepsilon_j] = 0$$

を満たす. (分散は未知パラメータ θ にも依存)

Remark

1. $\langle \rho, X_j \rangle = \text{Tr} \rho X_j$ は Hermite 行列を実線形空間とみなした時の「内積」
2. 誤差の分布は測定方法に依存. 簡単な場合は2値.
3. 通常の誤差が加わり, その分散が大きいと, 普通の統計モデルに帰着

最近の関連研究 (1/2)

各測定を n 回繰り返す場合

線形モデル

$$w_j = \theta_j + \varepsilon_j = \langle \rho, X_j \rangle + \varepsilon_j$$

各測定を n 回繰り返す場合は...

$$\bar{w}_j = \theta_j + \varepsilon'_j = \langle \rho, X_j \rangle + \varepsilon'_j, \quad \bar{w}_j = \frac{w_{j,1} + \dots + w_{j,n}}{n}$$

n が十分大きいと誤差は正規分布 (中心極限定理!) にかけて

$$\varepsilon'_j \sim N\left(0, \frac{1}{n} v_j\right), v_j := E_\theta[\varepsilon_j^2]$$

→ この場合はだいたい通常の統計に帰着する

(誤差分散に密度行列のパラメータが入ってるのが違う点)

最近の関連研究 (2/2)

量子ゆらぎを正規近似した線形モデル

$$\bar{w}_j = \theta_j + \varepsilon'_j = \langle \rho, X_j \rangle + \varepsilon'_j$$

$$\varepsilon'_j \sim N\left(0, \frac{1}{n} v_j\right), v_j := E_\rho[\varepsilon_j^2]$$

Remark

- ・中国のグループが最近, Qi et al. 2013 (quant-ph/1304.6827) でこのアイデアを利用して測定方法の選択に利用
- ・このままだと、すべてのパラメータにつき、 n 回測定をするので高次元トモグラフィには向いてない
- しかし、統計的手法をほとんどそのまま適用して、いくらでも改善できる。

圧縮センシングを用いた 密度行列の推定

圧縮センシングの導入 (1/2)

k 個の合成系 (量子ビットの場合)

$$(C^2)^{\otimes k} := C^2 \otimes \dots \otimes C^2 = C^{2^k}$$

密度行列のパラメータをすべて実験で推定するには $4^k - 1$ 種類の測定が必要*

$$\theta_1, \theta_2, \dots, \dots, \theta_{4^k-1}$$

Gross et al. (2009)

- ・ランダムにObservableを m 個選んで、その m 個は繰り返し測定を行う
- ・そのままだと残りのパラメータは推定できない

→ 先の「線形モデル」を下に統計での圧縮センシングを適用、
行列のスパース性を利用することで残りのパラメータも推定！

(*実験の実験では工夫することで、3%に減らしている)

圧縮センシングの導入 (2/2)

線形モデル

$$\bar{w}_j = \theta_j + \varepsilon_j = \langle \rho, X_j \rangle + \varepsilon_j$$

↑ 見たいけど直接みれない 全種類の測定のうち、ランダムに m 種類選ぶ
測定データの平均値 誤差の確率分布は、 $E_\rho[\varepsilon_j] = 0$
を満たす。(分散は未知パラメータ θ にも依存)

Matrix Lasso Estimator (Gross et al. (2009))

$$\hat{\rho}_{\text{Lasso}} := \arg \min_{\rho} \sum_{j=1}^m |\bar{w}_j - \langle \rho, X_j \rangle|^2 + \mu \|\rho\|_{\text{tr}}$$

- ・測定する量子状態は i 個準備
- ・ランダムに m 種類の測定を選んで d 回繰り返し測定 (その平均値が $\bar{w}_j$)
- ・ μ は正則化パラメータ (統計ではおなじみ; 設定については他の方の講演で)

※他にもDantzig selectorを提案、このグループは積極的に理論的な論文を出している

圧縮センシングの概略 ～物理研究者向け

基本的なアイデア

線形方程式の解 (誤差なし)

$$w_j = \langle \beta, x_j \rangle = \sum_a \beta_a x_{j,a}$$

ここで条件式に比べてパラメータの数が多いとしてみる

例: データ数2: パラメータ数3の場合

$$w_1 = 3 = \beta_1 + \beta_2 + 3\beta_3,$$

$$w_2 = 2 = 2\beta_1 - \beta_2 + \beta_3$$

→ パラメータ β を方程式の解とみると, 解は一意には定まらない
(ここまではただの線形代数!)

そこで β に条件を課してみる

解のスパース性の仮定 (1/2)

例: データ数2: パラメータ数3 の場合

$$w_1 = 3 = \beta_1 + \beta_2 + 3\beta_3,$$

$$w_2 = 2 = 2\beta_1 - \beta_2 + \beta_3$$

β に対するスパース性の仮定

→ 成分に0が1つ入っている という条件で探すと...

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/5 \\ 0 \\ 4/5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 5/3 \\ 4/3 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -3/4 \\ 5/4 \end{pmatrix}$$

一般の w の場合も同様.

しかし, このやりかたは, 次元が上がると「0」とおく場所の組み合わせが急激に増えるため数値計算の観点から×!

解のスパース性の仮定 (2/2)

例: データ数2: パラメータ数3 の場合

$$w_1 = 3 = \beta_1 + \beta_2 + 3\beta_3,$$

$$w_2 = 2 = 2\beta_1 - \beta_2 + \beta_3$$

β に対するスパース性の仮定

→ 成分でなく, ノルムの最小化を利用

L2ノルム → β ベクトルの原点からの距離最小の点が解として見つかる
計算量的には(逆行列の計算があるが)それなり
しかし, スパースでないベクトルが得られる!

L1ノルム → 3次元ではL1ノルム一定=原点中心の正八面体
最小化解は成分が0になりやすい
∴ 計算しやすい問題になる!

スパース性に基づいた推定

β の満たすべき式

$$w_j = \langle \beta, x_j \rangle = \sum_a \beta_a x_{j,a}$$

β に対するスパース性の仮定

→ L1ノルムの最小化に置き換える

パラメータ β の推定量

$$\hat{\beta} = \arg \min \|\beta\| \quad s.t. \ w_j = \langle \beta, x_j \rangle$$

$$\|\beta\| = \sum_a |\beta_a|$$

復元性

復元性

$$w_j = \langle \beta, x_j \rangle = \sum_a \beta_a x_{j,a}$$

β はある値(未知), x は自由に設定できて, w もわかったとしよう.

先の推定量で, 正しい β がわかるだろうか?

→ 実は β のスパース性(非ゼロの数)の条件と x を適切に選ぶことで, データ数(条件式)が少なくても, 正しい β が得られる! (その意味で「圧縮」!)

例: データ数2: パラメータ数3 の場合;

β の非ゼロ成分は「1つ」という条件で以下のデータが得られると?

良い x の場合(良い測定を選んだ)

$$w_1 = 1 = \beta_1 + \beta_2 + 3\beta_3,$$

$$w_2 = -1 = 2\beta_1 - \beta_2 + \beta_3,$$

悪い x の場合

$$w_1 = 1 = -2\beta_1 + \beta_2 + 3\beta_3,$$

$$w_2 = -1 = 2\beta_1 - \beta_2 + \beta_3,$$

理論的な結果

Romberg, and Tao (2006)
Donoho (2006)

入力 x をある分布に従ってランダムに選んでも, 高い確率で精度よく復元できることを数学的に証明!

(RIP= Restricted Isometry Property といった概念を導入し, 間違ひ確率を評価)

Candès et al (2009), Romberg (2009)

Pauli measurementsをランダムに選んでも, 高い確率で密度行列が精度よく推定できることを証明!

推定誤差の評価などの結果も出している (厳密なStatementはこみいつている)

RIPやスパース推定の応用は幾つかの講演で

問題設定の拡張

色々な拡張

誤差なしのケース

$$w_j = \langle \beta, x_j \rangle = \sum_a \beta_a x_{j,a}$$

誤差ありのケース

$$w_j = \langle \beta, x_j \rangle + \varepsilon_j$$

行列に拡張したケース

$$w_j = \langle M, X_j \rangle + \varepsilon_j$$

モデル自体は従来の線形回帰と同様だが, スパース性を考慮し, 計算効率などを考えることで, 様々な理論が発展・応用されている

→ 詳しくは本研究集会の各講演で!!

講演を聴くにあたって

1～2日目



- ・スパース推定、行列補完に関連した統計研究と応用に触れる
- ・機械学習特有の理論評価(2日目)の数理を学ぶ
- ・計算アルゴリズムや実装上の問題、対策などを知る

3日目

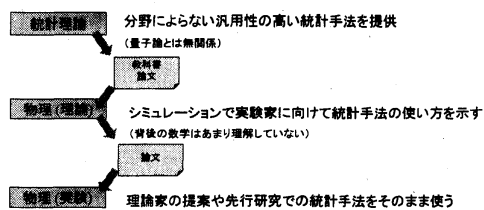
- ・連続系の量子トモグラフィに関連した話題(若手の発表!)

第五部 量子トモグラフィの課題解決に向けた 異分野間協働の世界的な動向

連携スタイルの変遷

従来:無言の連携

従来(2000年代)



今後：血の通った連携へ

現在～将来

実験技術の向上により巨大な量子系で様々な測定が可能

- ➡ ビッグデータ・複雑なモデルの取扱い(既存手法では不十分)
- ➡ 量子トモグラフィに特化した統計的手法の開発が急務

既製品からオーダーメイドの統計手法へ



中央: New Journal of Physics
量子トモグラフィの特集号 (2012年9月)

連携に向けた国内外の動き

連携の萌芽(国外)

1. New Journal of Physics:量子トモグラフィの特集号(2012年)

機械学習理論などの統計理論と量子物理の人たちとの交流が重要であると認識

"More communication between researchers working in these very different fields is crucial for further progress."

(編集者(物理论者)による序文)



2. Workshop on The Mathematical Methods of Quantum Tomography (2013年2月)



量子トモグラフィをテーマにした2回目の国際研究集会
["mathematical methods"が追加]

2年前の第1回に比べ、参加者数 2倍!!

Prof. Englert says...

In the workshop (page 19 in slides), he says,

Quantum aspects of the problem enter only through the Born rule. Except for the implied restrictions on the probabilities, there is no difference between state estimation in quantum mechanics and statistics. Accordingly, quantum mechanicians can benefit much from methods developed by statisticians.

1. 海外の量子物理の研究者(まだ一部)が、統計的手法の重要性を認識
2. 個人的に話した所「統計学者との直接の交流はしたいけれど難しいよね」と述べていた。

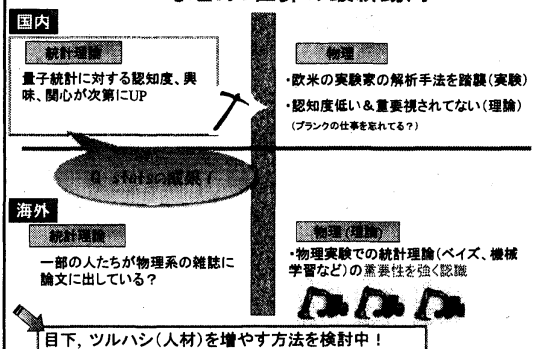


連携の萌芽(国内)

- a) 2011年度:統計関連学会連合大会
量子統計の一般講演
聴講者: 10人程度
- b) 2012年度:統計関連学会連合大会:
量子統計の企画セッション(含む 量子トモグラフィ)
聴講者: 30人以上
- c) 2012年度: 京都大 数理解析研 研究集会
(量子論における統計的推測の理論と応用)
参加者: 36人(名簿記載者のみ)

Q-statsの活動によって統計サイドでも空気が暖まってきている

まとめ:世界の最新動向



事務連絡

What's NEXT?

2014年RIMS 研究集会

- ・内容: 量子統計のトップダウン的な話題(講演者は物理の人)
- ・キーワード: 量子情報、量子確率、漸近理論、etc.?
- アンケートの希望なども考慮いたします

2015年RIMS 研究集会

- ・内容: 量子統計のボトムアップ的な話(講演者は統計中心?)
- ・キーワード: 量子トモグラフィ、信頼区間、スパース推定、データマイニング、モデル選択、ベイズ