

Bernstein 過程(reciprocal 過程)とその応用

童 祺俊[Tong Qijun](Accenture 株式会社)

※本発表内容は所属組織の見解を代表するものではありません

Bernstein 過程とは

Bernstein 過程(または reciprocal process)とは通常確率過程とは異なり,過去からの順方向と未来からの逆方向の発展の双方によって特徴づけられる確率過程であり,マルコフ過程の拡張として定義される。

定義: 確率過程 $\{X_t\}_{0 \leq t \leq 1}$ が Bernstein 過程であるとは前向きと後向きのフィルトレーション $\mathcal{F}_t^+, \mathcal{F}_t^-$ に対して任意の $t_0 < t_1 < t_2$ で $P(X_{t_1} \in A | \mathcal{F}_{t_0}^+, \mathcal{F}_{t_2}^-) = P(X_t \in A | X_{t_0}, X_{t_2})$ を満たす確率過程である。

例えば ウィーナー過程 W_t に対して $B_t := (W_t | W_1 = 0)$ は brownian bridge と呼ばれるベルンシュタイン過程の簡単な例である。

マルコフ性を持つ Bernstein 過程

マルコフ性を持つ Bernstein 過程は初期分布・終端分布・遷移カーネル h を用いて特徴づけられる。

命題: $h(x, t, y)$ を遷移核, $X_0 \sim \mu, X_1 \sim \nu$ とする。このとき、Bernstein 過程 $\{X_t\}_{0 \leq t \leq 1}$ の時刻 t での密度関数 Q は

$$q(x, t_1; z, t_2; y, t_3) := \frac{g(x, t_1 - t_2, z)g(z, t_2 - t_3, y)}{g(x, t_3 - t_1, y)}$$

$$Q(x, t; F, r; y, s) = \int q(x, t; z, r; y, s) dz \text{ と表される。}$$

Schrödinger Bridge とエントロピー正則化最適輸送

Schrödinger Bridge(SB)はマルコフ性を持つ Bernstein 過程の重要な例である。SB の定義は多数あるがここでは次のように定義する。

定義: 連続な Path space $\Omega = C([0, 1], X)$ 上の確率測度全体 $\mathcal{P}(\Omega)$ と $R \in \mathcal{P}(\Omega)$ を考える。このとき、

$$\inf_{P \in \mathcal{P}(\Omega)} \text{KL}(P|R), \text{ subject to } P_0 = \mu, P_1 = \nu$$

の解に対応する確率過程を Schrödinger Bridge という。

SB は Brownian bridge をエントロピー正則化最適輸送問題の解で混合したものとして表現できることが知られている。

命題: π をエントロピー正則化最適輸送

Bernstein 過程の応用

Benrstein 過程は始点と終点の分布を確率過程の意味で補間するような汎用的な問題設定であり、応用も補間に関わるものが多い。生成モデルでの活用では

Bernstein 過程を用いた量子系の記述

量子力学の文脈において、2 対の発展方程式の作用素を複素行列値ハミルトニアンとその随伴 (H, H^*) で表すことで、量子状態を記述する Bernstein 過程を構成することができる。これは複素数行列値連続確率過程+スピンのジャンプ過程を融合したマルコフ Bernstein 過程によるモデリングである。

定義: パウリタイプの Bernstein 過程の密度関数は以下の発展で支配される。

$$\begin{cases} \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial t} = H \eta(x, t) \\ \frac{\partial \eta^*(x, t)}{\partial t} = H^* \eta(x, t) \end{cases}, \text{ 境界条件 } \begin{cases} \eta(x, a) = \psi(x) \\ \eta^*(x, b) = \psi^*(x) \end{cases}$$

Schrödinger bridge による生成モデル/サンプリング

Schrödinger bridge からのサンプリングは以下のランジェバン方程式によって構成され、オイラー丸山法によってサンプリングが可能となる。

Schrödinger Bridge による軌道推定

シングルセル解析などにおいて、観測値から途中の対象の経路を推定することが

オープンプロブレム

Schrödinger Bridge 以外のマルコフ性を持つ

Bernstein 過程のモデル化

マルコフ過程の確率制御,最適輸送理論によるモデル化は

非マルコフ過程の Bernstein 過程

マルコフ性を持たない Bernstein 過程は,一般の非マルコフ過程よりは良い性質を持っている。そこには非マルコフ過程よりも扱いやすい 定式化が存在するのではないかと考える

逆問題への応用

確率的なシステム(例えば量子系)において,観測の機会が限られる場合,限られた観測から,その中間の状態を推定する逆問題への応用が考えられる。Bernstein 過程の発展方程式を近似する Physics-informed machine learning を構築できるのではないかと考えている

参考文献