

# 統計的推論と統計力学の交差点を再考する

## [1] 要旨

統計的推論とは、データに基づいて興味ある対象に関する情報を抽出し活用する情報科学の方法である。統計力学は推論時に生じる現象を解明するための強力な方法論の一つであるが、既存研究のほとんどは問題設定の極端な単純化を必要とし、実データを用いたデータ分析に定量的な予言を与えることが難しかった。本研究では統計力学のレプリカ法と呼ばれる方法に大正準集団の考えと変分法を組み合わせることで、実データでの推論に対しても定量的な予言を与えられることが示された。

## [2] 本文

本研究で考察の対象となっている統計的推論とは、データに基づいて興味ある対象の振る舞いを記述する統計モデルを推定し、それを対象の理解や将来の予測に活用する情報科学の方法である。ここでは特に、推論の機序の解明や、推論時にどのような現象が生じるかの定量的な予言といった、統計的推論の理論的な側面にその興味の力点が置かれている。

このような研究は、物質的世界の現象を扱うことの多い物理学とは関係が薄いようにも思われるかもしれない。しかし、1990年に Sompolinsky らは統計的推論で用いられる事後分布と、不純物の入った系におけるボルツマン分布が形式的に酷似していることを指摘し (図 1)、実際に推論に関する非自明な現象が不規則系の統計力学の方法を用いて解析できることを示した。これ以降、統計的推論の理論的解析は不規則系の統計力学の主要な話題の 1 つとなり、現代でも機械学習システムの解析で盛んに活用されている。

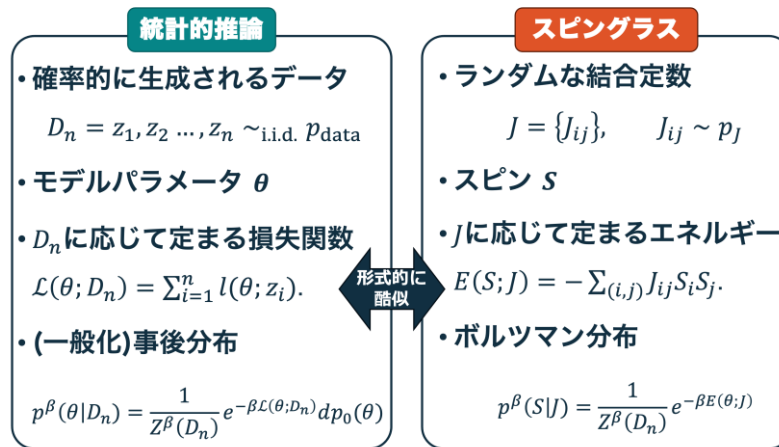


図 1. 事後分布と不規則系の統計力学におけるボルツマン分布の類似性。不規則系の代表例であるスピングラスを例にとった。ともにランダムな確率変数に条件付けられた大自由度の確率密度関数を考察していることがわかる。データがクエンチされたランダムネスに、パラメータが動的なマイクロ自由度に、損失関数がエネルギーに、事後分布がクエンチランダムネスで条件付けられたボルツマン分布に対応する。

しかしながら、これまでの統計力学的な解析のほとんどは極端に単純化したデータ生成分布における推論の問題を考え、それに対する厳密解を導出するアプローチに依存してきた。これらはしば

しばしば非自明な知見を与えてくれるものの、一般的なデータに対する定量的な予言を与えるような普遍的な公式を導出したり、データ生成分布が未知である実データ解析で生じる現象を予言したりするには無力であり、実務的な有用性には乏しかった。この点は情報科学の側からはしばしば批判的となり、データ分析者に工学として有用な知見を与えられるような統計力学的な方法を整備することは重要な課題となっていた。

最近、東京大学理学系研究科附属知の物理学研究センターのグループは、従来のパラメトリックモデルを用いた推論の統計力学的解析を再考した。ここでは、不規則系の統計力学の手法であるレプリカ法に大正準集団の考えと変分法を組み合わせることで、与えられたデータ生成分布に対して推論問題を近似的に記述する数理モデルを適応的に構築出来ることが示された。この枠組みを用いることで、漸近的な状況で訓練損失から汎化損失を一般的に予言する情報量規準を再導出し、さらに実データに対する汎化損失のデータサイズ依存性を予言する学習曲線を描くことに成功した。この成果は JPSJ の 2025 年 12 月号に掲載された。

近似解析の方法自体は 2000 年代初頭にも提案されていたが、一部のモデルの解析に限定され、その解釈には不明瞭な点も多かった。それに対し、この研究では現代のニューラルネットワーク等につながるような陽にパラメータを持つモデルの推論を考察し、さらに、レプリカ法における大正準集団とブートストラップ法の関係の解明や、情報量規準の純粋に統計力学的な導出も行っている。これまでの統計力学的な解析は、情報科学のなかにおいて「特殊な条件で巧妙に問題を解く変わり種」のような浮いた立場にあったが、今回の結果は統計力学の伝統的な数理統計学的との明確な接点を示すものである。

今回の研究で扱われた問題は比較的初等的なもので、提案法の本格的な有用性の判断は今後の展開を待つ必要がある。しかし、今回の結果は統計力学的なアプローチの新たな可能性を示すものである。今後、多層ニューラルネットワークなどのより実践的なモデルを用いたデータ解析における現象や法則の予言への展開が期待される。

原論文（2025 年 11 月 14 日公開済）

Variational Gaussian Approximation in Replica Analysis of Parametric Models

T. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **94**, 124801 (2025).

< 情報提供：高橋昂（東京大学理学系研究科附属知の物理学研究センター） >