

位置と運動量の同時測定における縮小推定

松田 孟留, 田中 冬彦

東京大学大学院 情報理工学系研究科

Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo

平成 25 年 1 月 7 日

1 はじめに

量子力学では, 粒子の位置と運動量がともに確定した状態はないことが知られている. しかし, 位置と運動量のそれぞれを単独で射影測定したときの期待値であれば状態ごとに定まっていて, この期待値パラメータを適当な非射影測定を用いて同時に推定することは可能である. この非射影測定を本稿では同時測定とよぶことにする. 既に [2] によって共変的 (covariant), つまり位置と運動量の原点のとり方によらず不変な同時測定法が提案されている. 一方, 統計理論において, 複数 (3 つ以上) の location パラメータの同時推定では共変推定量は非許容的であることが明らかにされている [1]. 特に, 分散既知の多変量正規分布の平均パラメータの推定においては, 共変推定量を優越する推定量として, Stein の縮小型の推定量が知られている [3]. そこで本稿では, 波束に対する位置と運動量の同時測定の問題に縮小推定を適用可能であることを示す.

2 問題設定

本稿では式 (1) のような波動関数族 (波束) を考える.

$$\psi(\xi; \theta_1, \theta_2, \tau^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau^2}} \exp\left(i\theta_2\left(\xi - \frac{\theta_1}{2}\right) - \frac{(\xi - \theta_1)^2}{4\tau^2}\right) \quad (1)$$

すなわち, 系の状態はある θ_1, θ_2 を用いて式 (1) の形になっていると仮定する. τ^2 は既知としておく. この系に何らかの測定を行い, 測定結果をもとに, 位置の期待値パラメータ θ_1 と運動量の期待値パラメータ θ_2 を推定するのが目標である.

式 (1) の状態に対して位置 q のみを射影測定したときの測定値の分布は

$$q \sim N(\theta_1, R_q), \quad R_q = \tau^2 \quad (2)$$

となり, 運動量 p のみを射影測定したときの測定値の分布は

$$p \sim N(\theta_2, R_p), \quad R_p = \frac{\hbar^2}{4\tau^2} \quad (3)$$

となる. ここで, $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ とは, X が平均 μ , 分散 σ^2 の正規分布に従う, という意味である.

以下では, 議論の簡単のためにまず $\tau^2 = \frac{\hbar}{2}$, したがって $R_q = R_p = \frac{\hbar}{2}$ のときを考えることにする. 後述するが, 本稿の結果は $R_q \neq R_p$ のときにも有効である.

式 (2), (3) では位置と運動量の片方しか測定できないが, 非射影測定を考えると, 位置と運動量の同時測定が可能になる. [2] で提案されている共変的な同時測定が式 (4) である.

$$M(dqdp) = |\psi; q, p, \sigma^2\rangle \langle \psi; q, p, \sigma^2| \frac{dqdp}{2\pi} \quad (4)$$

ここで, $|\psi; q, p, \sigma^2\rangle$ は

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(ip\left(\xi - \frac{q}{2}\right) - \frac{(\xi - q)^2}{4\sigma^2}\right) \quad (5)$$

という波束の波動関数であり, σ^2 は測定者が自由に設定できる量である.

状態が $|\phi\rangle$ のとき, 式 (4) の共変測定による測定値の分布は,

$$\Pr((q, p) \in A) = \int_A \langle \phi | M(dqdp) | \phi \rangle = \int_A |\langle \phi | \psi; q, p, \sigma^2 \rangle|^2 \frac{dqdp}{2\pi} \quad (6)$$

となる. 特に状態 $|\phi\rangle$ が波束 $|\psi; \theta_1, \theta_2, \tau^2\rangle$ のときは解析的に計算できて,

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \sim N\left(\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} R_q + \sigma^2 & 0 \\ 0 & R_p + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} \end{pmatrix}\right) \quad (7)$$

を得る.

さて, R_q は位置のみ測定したときの分散で, R_p は運動量のみ測定したときの分散であった. 一方, Holevo の共変測定による位置と運動量の分散の和は

$$R_{\text{cov}} := (R_q + \sigma^2) + \left(R_p + \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}\right) \quad (8)$$

で, これは $\sigma^2 = \frac{\hbar}{2}$ のとき $R_q + R_p + \hbar$ で最小となる (以下では σ^2 を $\frac{\hbar}{2}$ に固定する). よって, 共変測定では位置と運動量を別々に測定したときに比べて \hbar だけ分散が大きくなることが分かる. これは位置と運動量の非可換性に由来する効果と解釈できる.

以上の位置と運動量の同時測定の問題を多次元で考える. これは粒子 (自由度) が複数ある状況や, 複数モードの光で通信する状況に対応する. 空間 d 次元 (パラメータ $2d$ 次元) のとき, 共変測定による分布は

$$q_i \sim N(\theta_i, \hbar), \quad p_i \sim N(\theta_{d+i}, \hbar) \quad (i = 1, \dots, d) \quad (9)$$

となり, 各成分で分散が等しい.

3 縮小推定

本節で縮小推定について簡単に説明する. まず, 統計的決定理論の枠組みについて, 本稿に必要な範囲で導入を行う.

3.1 統計的決定理論

取り扱うデータが未知のパラメータ θ を含んだ確率分布 $p(x|\theta)$ に従うとする. たとえば正規分布 $N(\mu, \sigma^2)$ では $\theta = (\mu, \sigma^2)$ であり,

$$p(x|\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (10)$$

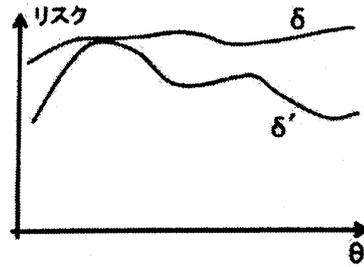


図 1: 非許容的な推定量

となる。

確率分布 $p(x|\theta)$ に従うデータ X を観測し、これをもとに θ を推定するのが目標である。データから推定値への関数を $\hat{\theta} = \delta(X)$ と書き、推定量とよぶ。たとえば、 $\theta = \mu, X = (X_1, \dots, X_n)$ として、

$$X_1, \dots, X_n \sim N(\mu, 1) \quad (11)$$

とすると、

$$\delta(X) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (12)$$

という推定量（標本平均）が考えられる。

この設定の下で、異なる推定量を比較するために損失とリスクという概念を導入する。損失 $L(\theta, \delta(X))$ とは、推定値 $\delta(X)$ がパラメータの真の値 θ からどの程度ずれているかの尺度で、たとえば二乗誤差 $|\theta - \delta(X)|^2$ がよく使われる。リスク $R_\delta(\theta)$ とは、パラメータの真の値が θ であるときに推定量 δ を用いた場合の損失の期待値であり、

$$R_\delta(\theta) = E_\theta[L(\theta, \delta(X))] \quad (13)$$

と定義される。リスクをもとに推定量を比較するのが統計的決定理論の考え方である。

リスクを用いて許容的という概念を導入する。推定量 δ に対して、

$$R_\delta(\theta) \geq R_{\delta'}(\theta) (\forall \theta) \quad (14)$$

$$R_\delta(\theta) > R_{\delta'}(\theta) (\exists \theta) \quad (15)$$

なる推定量 δ' が存在するとき、 δ は非許容的という。すなわち、 δ が非許容的であるとは、 δ を一様に上回る推定量 δ' が存在する、ということである（図 3.1）。

3.2 縮小推定

縮小推定について説明する。 X_1, \dots, X_d の d 個の変数がそれぞれ平均 θ_i 、分散 1 の正規分布に独立に従うとする。すなわち、

$$X_i \sim N(\theta_i, 1) \quad (i = 1, \dots, d) \quad (16)$$

とする。このとき、 x_1, \dots, x_d を観測して $\theta_1, \dots, \theta_d$ を推定することを考える。

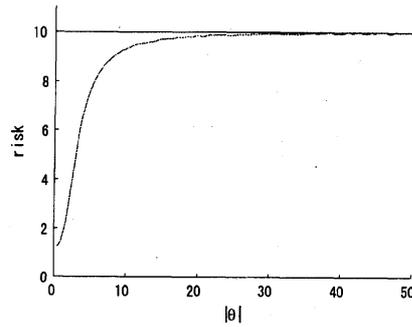


図 2: $d = 10$ でのリスクの比較 (横軸: $|\theta|$, 縦軸: リスク)

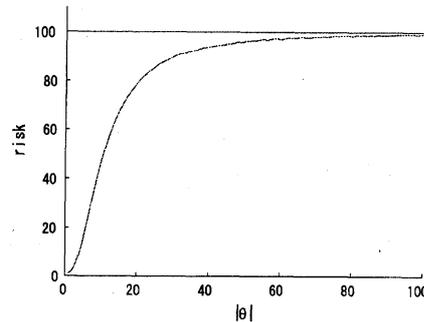


図 3: $d = 100$ でのリスクの比較 (横軸: $|\theta|$, 縦軸: リスク)

以下では、損失を二乗誤差として考える。この損失のもとでは、最尤推定量 $\delta^{\text{cov}}(x) = x$ は $d \geq 3$ のときは非許容的であることが Stein によって示された。実際に、縮小推定量と呼ばれる、共変性を外した推定量でリスクを一様に小さくできることも分かっている。縮小推定量の例として、James-Stein 推定量

$$\delta^{\text{JS}}(x) = \left(1 - \frac{d-2}{|x|^2}\right) x \quad (17)$$

や James-Stein 推定量の positive-part

$$\delta^{\text{JS}+}(x) = \left(1 - \frac{d-2}{|x|^2}\right)_+ x$$

が挙げられる。ここで、 $(a)_+ = \max(a, 0)$ である。

$d = 10, 100$ のときに δ^{cov} と $\delta^{\text{JS}+}$ のリスクを比較したのがそれぞれ図 2, 図 3 である。青が δ^{cov} , 赤が $\delta^{\text{JS}+}$ を表している。 $|\theta|$ が小さいほど、縮小によってリスクが大幅に小さくなるのが分かる。

また、 $d = 10, d = 100$ それぞれでの、 δ^{cov} のリスクに対する $\delta^{\text{JS}+}$ のリスクの比をプロットしたのが図 4 である。赤が $d = 10$, 緑が $d = 100$ を表している。次元が大きいほど縮小によるリスクの改善が大きいことが分かる。

4 同時測定への縮小推定の適用

空間 d 次元 (パラメータ $2d$ 次元) のとき、Holevo の共変測定による測定値の分布は

$$q_i \sim N(\theta_i, \hbar), \quad p_i \sim N(\theta_{d+i}, \hbar) \quad (i = 1, \dots, d) \quad (18)$$

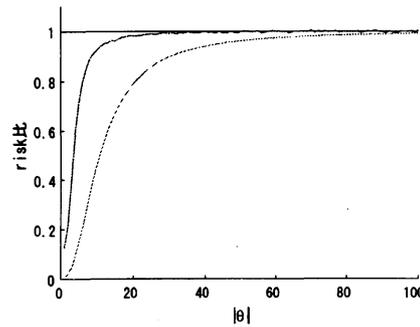


図 4: $d = 10, 100$ でのリスク改善の比較 (横軸: $|\theta|$, 縦軸: リスク比)

であった。よって、測定値から縮小推定することで、リスク（平均二乗誤差）を一様に小さくできる。これは次元が大きいほど有効である。

式 (18) は波束で $R_q = R_p$ という特殊の場合の結果であったが、より一般の状態族でも縮小は有効である。まず、波束で $R_q \neq R_p$ の場合は、各成分で分散が異なる

$$q_i \sim N(\theta_i, R_q + \frac{\hbar}{2}), \quad p_i \sim N(\theta_{d+i}, R_p + \frac{\hbar}{2}) \quad (i = 1, \dots, d) \quad (19)$$

という分布に対する推定になるが、この場合でも縮小型の推定量が最尤推定量を優越することが理論的に示されている [3].

より一般に、ある波動関数 $\psi(\xi - \theta_i; 0, 0)$ に対して位置と運動量の原点をずらして得られる波動関数族

$$\psi(\xi; \theta_i, \theta_{d+i}) = \exp\left(i\theta_{d+i}\left(\xi - \frac{\theta_i}{2}\right)\right) \psi(\xi - \theta_i; 0, 0) \quad (i = 1, \dots, d) \quad (20)$$

の期待値パラメータ $\theta_1, \dots, \theta_{2d}$ の推定を考えると、[1] で「パラメータ 3 次元以上の location model に対しては共変推定を一様に上回る推定量が存在する」ということが示されているため、 $2d \geq 3$, すなわち空間 2 次元（パラメータ 4 次元）以上であれば、適当な推定量を用いて共変測定のリスクを一様に小さくできることが保証される。

5 まとめ

本稿では、非射影測定による位置と運動量の期待値パラメータの同時推定の問題に対して、縮小推定を用いることで Holevo の共変測定のリスク（平均二乗誤差）を一様に小さくできることを示した。今後の課題としては、Holevo の共変測定に限らず一般の測定での考察、波束以外の状態族についての計算、などが挙げられる。

参考文献

- [1] L. D. Brown. On the admissibility of invariant estimators of one or more location parameters. *Ann. Math. Stat.*, Vol. 37, pp. 1087–1136, 1966.
- [2] A. S. Holevo. *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory*. North-Holland, Amsterdam, 1982.

- [3] E. L. Lehmann and G. Casella. *Theory of Point Estimation*. Springer, 1998.