



**TURUN
YLIOPISTO**

STANDARDIKONTEKSTUAALISUUSTEORIA,
KORRELAATIOIDEN ANALYSOINTI KYTKENNÖILLÄ
KVANTTIMEKAANISISSA JA MUISSA KONTEKSTUAALISISSA
TUTKIMUSAINEISTOISSA R-OHJELMISTOLLA

Jarmo Sukoinen

Pro gradu -tutkielma
Kesäkuu 2024

Tarkastajat:
Apulaisprof. Janne Kujala
Prof. Henri Nyberg

MATEMATIIKAN JA TILASTOTIETEEN LAITOS

Turun yliopiston laatu­järjestelmän mukaisesti tämän julkaisun alkuperäisyys on tarkastettu Turnitin OriginalityCheck-järjestelmällä

TURUN YLIOPISTO
Matematiikan ja tilastotieteen laitos

JARMO SUKONEN: Standardikontekstuaalisuusteoria,
korrelaatioiden analysointi kytkennöillä kvanttimekaanisissa ja muissa kontekstuaalisissa tutkimusaineistoissa R-ohjelmistolla
Pro gradu -tutkielma,
Tilastotiede
Kesäkuu 2024

Tässä työssä esitetään miten R-ohjelmistolla voidaan tarkastella dikotomisten syklisten systeemien kontekstuaalisuutta. Määritellään standardikontekstuaalisuusteorian mukaisesti riittävä kriteeri epäkontekstuaalisuudelle. Esitetään kaksi erilaista tapaa R-ohjelmistolla miten havaintoaineistosta voidaan havaita kriteerin mukainen epäkontekstuaalisuus valitulla alfa-tasolla. Määritellään sopiva syklinen systeemi, josta epäkontekstuaalisuus on mahdollista osoittaa ja käydään läpi teorian tarvitsemat työkalut, kuten esimerkiksi kytkennät.

Pääsääntöisenä lähteenä käytetään Janne Kujalan, Ehtibar Dzhafarovin ja Jan-Åke Larssonin artikkelia: Necessary and Sufficient Conditions for Extended Noncontextuality in a Broad Class of Quantum Mechanical Systems.

Asiasanat: Contextuality-by-Default, kontekstuaalisuus, kytkennät, kvanttikorrelaatio, syklliset systeemit.

Sisällys

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Johdanto | 1 |
| 2 | Standardikontekstuaalisuusteoria | 2 |
| 3 | Tilastollinen riippuvuus, riippumattomuus ja yhteisjakaumat | 4 |
| 3.1 | Kvanttikorrelaatio | 4 |
| 3.2 | Tilastotieteellinen riippumattomuus | 5 |
| 4 | Kvanttimekaniikan katselmus | 7 |
| 4.1 | Heisenbergin epätarkkuusperiaate | 7 |
| 4.2 | Lomittuneet hiukkaset ja tiedon teleportaatio | 8 |
| 4.3 | Taustamuuttujamallit | 9 |
| 4.4 | Kochen-Speckerin lause ja Bellin lause | 10 |
| 4.5 | Legget-Garg ja KCBS | 10 |
| 5 | Konteksti | 12 |
| 6 | Kytkenät | 13 |
| 6.1 | Yhtenevä ja epäyhtenevä liitos | 13 |
| 6.2 | Maksimaalinen kytkentä | 14 |
| 7 | CBD | 18 |
| 7.1 | Dikotomisat syklistä systeemit | 18 |
| 7.2 | Epäkontekstuaalisuuden mallintaminen | 18 |
| 8 | Sovellus | 21 |
| 8.1 | Aineiston generointi | 21 |
| 8.2 | Kontekstuaalisuuden testaus | 23 |
| 8.3 | Luottamusvälit ja maksimointi | 24 |
| 8.4 | Bootstrap | 26 |
| 9 | Yhteenveto | 28 |
| A | Liitteet | 30 |
| B | R-koodi | 34 |

Bunch=rypäs(joukko satunnaismuuttujia tietyssä kontekstissa)
Contextuality-by-Default: standardikontekstuaalisuus
Quantum contextuality: kvanttikontekstuaalisuus
Quantum entanglement: lomittuminen
Coupling: kytkentä
Connection: liitos
Coupling event: kytkentätapahtuma
Content: sisältö
Context: konteksti
Co-occur: tapahtua samanaikaisesti
(Non)locality: (epä)lokaalisuus
Stochastically unrelated: stokastisesti erillinen
Self-coupling: Itseis-kytkentä

1 Johdanto

Standardikontekstuaalisuusteoria (Contextuality-by-Default theory) on standardin todennäköisyysteorian mukainen teoria, joka huomioi eksplisiittisesti ja oletusarvoisesti useiden erillisten todennäköisyysavaruuksien tarpeen silloin, kun tarkastellaan tilastollisesti erillisiä kokeita. Teorian motivaationa on toiminut psykologian ja kvanttifysiikan ongelmat, etenkin kvanttikontekstuaalisuuden kuvaaminen. Teorian kehitys on lähtenyt psykologian alalta, mutta myös kvanttifysiikka on sen tärkeä sovelluskohde, koska kvanttifysiikan puolelta löytyy aineistoja, joita on todella hankala mallintaa muilla tavoilla kontekstuaalisuutta käyttämättä. Lähtökohtana on satunnaismuuttujien määrittelyminen sen perusteella, mitä mitataan ja missä olosuhteissa mittaus tapahtuu. Tärkeimpänä tässä on mittausolosuhteiden erottelu eri konteksteihin. Standardikontekstuaalisuusteoria, käytetään tästä jatkossa kompaktimpaa Cbd-teoria lyhennettä, jakaa satunnaismuuttujat toisistaan erillisiin konteksteihin, joiden välille ei voida muodostaa yhteisjakaumia. Perinteinen todennäköisyysteoria ei vastaavasti tarkkaan määritä milloin satunnaismuuttujille voidaan määrittellä yhteisjakauma ja milloin ei. Tämä tarkennus antaa paremmat työkalut tilastollisen riippuvuuden mallintamiseen hankalissa erikoistapauksissa, esimerkiksi juuri kvanttifysiikan alalla.

Tarkoituksena on luoda R-ohjelmisto, jolla voidaan tarkastella havaintoaineiston kontekstuaalisuutta niin sanottujen dikotomisten syklisten systeemien tapauksessa. Tämä voidaan suorittaa ainakin kahdella eri tavalla, ja tarkoituksena on vertailla näiden tapojen tehokkuutta eri tapauksissa generoituja aineistoja hyväksi käyttäen.

Luvussa kaksi esitellään varsinainen standardikontekstuaalisuusteoria (CbD) pääpiirteisesti menemättä vielä yksityiskohtiin. Luvussa kolme käydään tarvittavia perusasioita läpi, jotta varsinaiseen teoriaan päästään sisälle. Ehkä tärkeimpänä asiana on se, miten teoria poikkeaa perinteisestä todennäköisysteoriasta. Tilastotieteellinen riippuvuus tullaan määrittämään hieman normaalista poikkeavalla tavalla. Luvussa neljä tutustutaan joihinkin kvanttimekaniikan asioihin. Vaikka tämä ei ole varsinaisen mielenkiinnon kohteena, käsittelemme asioita, jotka auttavat ymmärtämään käsiteltävää teoriaa. Kvanttimekaanisten aineistojen käyttäytyminen saattaa olla erittäin outoa verrattaessa mihinkään muualla tavattaviin aineistoihin. Tämän vuoksi on hyvä käsitellä hieman kvanttimekaniikan perusasioita liittyen kyseiseen ongelmaan, jota pyritään mallintamaan. Luvussa viisi ja kuusi käsitellään konteksti ja kytkennät, jotka ovat harvinaisempia työkaluja joita käytetään Cbd-teoriassa. Varsinainen teoria funktioineen esitetään ja todistetaan luvussa seitsemän, ja luvussa kahdeksan päästään käytännön testaukseen generoiduilla aineistoilla.

Tässä työssä käytetyt koodit on kirjoitettu R-ohjelmistolla, ja kaikki nämä koodit löytyvät liitteenä työn loppuosasta.

2 Standardikontekstuaalisuusteoria

Standardikontekstuaalisuusteoria on tilastotieteellinen mallinnustapa, jota käytetään muun muassa mallintamaan kvanttitason kontekstuaalisuutta. Tarkemmin kyseessä on normaalista poikkeava lähestymistapa todennäköisyysteoriaan. Perinteinen Kolmogorovin todennäköisyysteoria ei anna riittäviä työkaluja määräämään milloin satunnaismuuttujilla on yhteisjakauma. Varsinkin kvanttimekaniikan kannalta tarvitsemme tarkemmat määrittelyt sille, milloin satunnaismuuttujilla on yhteisjakauma, milloin ei. Mitä se tarkoittaa, että kahdella satunnaismuuttujalla ei ole olemassa yhteisjakamaa, ja miten muuttujien välinen korrelaatio liittyy tähän. Kyseessä on siis vaihtoehtoinen teoreettinen pohja todennäköisysteorialle, mitä voidaan pitää laajenuksena tai tarkennuksena Kolmogorovin todennäköisysteorialle. Teoriaa ei siten voida todistaa tai kumota empiirisellä datalla. Kyseessä ei ole luonnon ilmiötä kuvaava malli, vaan teoreettinen pohja todennäköisysteorialle.

Teorian varsinaiselle tarpeelle lähtökohtana on kvanttimekaniikan ja klassisen fysiikan välinen ristiriita, mikä hankaloittaa huomattavasti esimerkiksi tilastollista mallintamista kvanttifysiikan tutkimuksissa. Vaikka tämä on tärkein sovelluskohde teorialle, se ei tarkoita ettei sitä hyödynnettäisi kvanttimekaniikan ulkopuolella. Epäkontekstuaalisuuden suhteen kvanttifysiikan puolella ongelmana voi olla esimerkiksi kokeellinen mittaus lomittuneista hiukkasista. Saadaan aineisto, jossa on kaksi satunnaismuuttujaa, jotka joko korreloivat vahvasti tai ovat jopa täydellisesti toisistaan riippuvia. Tilastotieteilijä normaalisti päättlee, että muuttujien välillä on joko syy-seuraussuhde tai on olemassa jokin taustamuuttuja joka selittää riippuvuuden. Tosin samanaikaisissa spin-mittauksissa syy-seuraussuhde, eli suora vaikutus, on mahdoton klassisessa mielessä, koska tieto tai ”vaikutus” ei voi kulkea valoa nopeampaa. Tämän takia klassiset fyysikot kannattavat taustamuuttujamalleja selittämään korrelaatiota. Kvanttifysiikan teorian mukaan taas taustamuuttujat eivät riitä selittämään havaintoja, mikä johtuu kvanttikontekstuaalisuudesta.

Yksinkertaisissa tilanteissa havaitut korrelaatiot olisivat vielä selitettävissä samasta lähteestä tulevien hiukkasten kantaman informaation avulla, mutta tämä ei enää välttämättä toimi kun yhdistetään korrelaatiot eri asetuksilla tehdyillä kokeilla. CbD-teoria antaa tavan vastata tähän ongelmaan, tai ainakin antaa järkevän tavan mallintaa ilmiötä ilman, että todennäköisyyslaskennan sääntöjä tarvitsee muuttaa. Epäkontekstuaalinen vaikutus voidaan kuvata käyttäen kytkentää, jolloin matemaattisesti ”kierretään” kvantti- ja klassisen fysiikan välinen ristiriita, tai tarkemmin sanottuna ristiriidan aiheuttamat mallinnusongelmat. Epäkontekstuaalisuutta voidaan etsiä ja mitata tilastotieteen keinoin, ilman että fyysikot syyttävät meitä luonnolakiensa rikkomisesta. Uuden mallinnustavan käyttäminen tuntuu myös jotenkin luonnolliselta, koska kvanttifysiikassa esiintyvät vaikutukset voivat olla hyvin tavallisesta poikkeavia. Koska kuvataan asioita, joihin ei olla makrotasolla törmätty, on loogista etteivät vanhat menetelmät välttämättä suoraan sovellu.

CbD-teoria mallintaa satunnaismuuttujia, jotka on määritelty niiden kontekstin (context) ja sisällön (content) avulla. Sisältö määrittää sen, mitä satunnaismuuttuja kuvaa. Kontekstilla rajataan muuttujien välistä riippuvuutta, siten että satunnaismuuttujat voivat olla yhteisjakautuneita vain jos ne jakavat saman kontekstin. Koemittauksessa sisällön siis määrittää se mitä mitataan, ja kontekstin määrittää

se minkälaisissa olosuhteissa mittaus tapahtuu. Teoria siis käsittelee toisistaan tilastollisesti erillisiä satunnaismuuttujien ”ryppäitä” (bunch), jossa ryppäiden sisällä muuttujat voivat olla riippuvaisia toisistaan. Näitä ryppäitä, eli konteksteja, yhdistävät toisiinsa muuttujat, jotka omaavan saman sisällön.

Ennen kuin päästään itse varsinaiseen teoriaan, käymme läpi sen osa-alueita. Teoria käyttää hyväksi kytkentöjä, minkä lisäksi käsitteet kuten konteksti ja kontekstuaalisuus pitää määritellä. Käymme myös läpi pintapuolisesti kvanttimekaniikan teorioita ja tuloksia, koska tämä tarvitaan selittämään motivaatiota teorian taustalla, tai ainakin teorian logiikan ymmärtäminen vaatii tutustumista joihinkin kvanttimekaniikan ilmiöihin. Tietyt kvanttimekaniikan asiat sotivat tavallista determinististä logiikkaa vastaan, joten nämä asiat täytyy ottaa erityisesti huomioon. Sitä ennen käymme läpi todennäköisyysteorian perusteita korrelaation, riippumattomuuden ja yhteisjakaumien osalta, koska näihin perusasioihin täytyy mennä normaalia syvemmälle laajentaen joitain perusteoreettisia työkaluja. Näitä perusasioita käsitellään juuri siksi, että niihin kohdistuu jokin muutos. Myöhemmin soveltavassa osassa käytetään suoraviivaista bootstrap-otantaa ja lasketaan Bonferroni-korjattuja luotamusvälejä. Koska näitä ei käytetä normaalista poikkeavalla tavalla, nämä oletetaan tutuiksi, ja siksi niiden teoriaa ei käsitellä erikseen. [12],[13]

3 Tilastollinen riippuvuus, riippumattomuus ja yhteisjakaumat

Määritellään ensin joitain tilastotieteellisiä termejä, jotta voidaan käsitellä varsinaista teoriaa. Yleisesti tilastotieteellisiä teorioita sovelletaan johonkin käytännön ongelmaan, ja katsotaan miten saadaan aikaan hyödyllisiä tuloksia. Deterministisesti määritettyjä tapahtumia mallinnetaan jollain todennäköisyysmallilla. Kvanttifiysiikan tapauksessa käytettävät tilastotieteelliset teorit ovat ”sotkeutuneet” osaksi itse ongelmaa, jolloin tilastotieteellisten perusteorioiden määrittely tulee tärkeäksi. Kvanttifiysiikan rakennetta voidaan pitää ”epäselvänä” tai ainakin sitä yritetään nyt kuvata jollain tavalla. Voimme luoda jollekin ilmiölle todennäköisyyksiin perustuvan rakenteen, teemme sen perusteella mittauksia, ja näiden perusteella saamme vaikka aikaiseksi todennäköisyyksiin perustuvan mallin, joka selittää osan maailmankaikkeuden rakenteesta. Tässä ajatusmallissa voidaan havaita mahdollinen kehäpäätelmä, sillä kvanttitasolla systeemissä voi olla aitoa satunnaisuutta. Kun sovitetaan eri tilastotieteellisiä malleja, voivat nämä vaikuttaa oletuksiin mallinnettavan ilmiön rakenteesta. Meidän on lukittava tarkkaan käytettävät todennäköisyysteorian menetelmät ja määritelmät, kun kvanttimekaniikan rakenteita mallinnetaan. Tämän takia eri menetelmiä ei voida mielivaltaisesti käyttää käytännön mittaustuloksia tutkittaessa.

Perinteinen utilitaristinen tilastotieteen soveltaminen ei nyt ole soveliasta, eli ei riitä että saadaan ”hyödyllisiä”, mutta epäeksakteja tuloksia. Esimerkkinä tästä toimii juuri lomittuneiden hiukkasten tapaus. Taustamuuttujien käyttö noudattaa klassisen fysiikan näkemystä ja suora syy-seuraussuhde puoltaa kvanttifiysiikan kantaa. Malleja ei voida käyttää vain konkreettisten tulosten mallintamiseen. Varsinkin kun klassinen fysiikka tulkitsee maailman deterministiseksi ja kvanttifiysiikka taas mahdollistaa oikean satunnaisuuden. Tämän takia käytetyt tilastotieteelliset mallit voivat tietyssä mielessä vaikuttaa jopa siihen miten satunnaisuus määritetään.

3.1 Kvanttikorrelaatio

Kvanttifiysikassa (kvantti)korrelaatiolla tarkoitetaan kahden muuttujan tulon odotusarvoa. Odotusarvoa käytetään korrelaation mittana, koska sen ääriarvot antavat sopivasti joko 1 tai -1 , riippuen havaintoparin tuloksesta. Esimerkiksi spinmittauksissa saadaan tuloksena joko ylös tai alas, jota merkitään vastaavasti arvoilla 1 ja -1 . Nyt saman suuntaiset spinin saavat tulona arvon yksi, ja vastakkaisuuntaiset arvot saavat tulon arvon miinus yksi. Tätä pidetään riittävänä korrelaation mittana. Yleisemmin

$$\langle A B \rangle = 1 \times 1 \times P(A = 1, B = 1) + 1 \times (-1) \times P(A = 1, B = -1) \\ + (-1) \times 1 \times P(A = -1, B = 1) + (-1) \times (-1) \times P(A = -1, B = -1),$$

tai kun oletetaan muuttujien dikotomisuus:

$$\langle A B \rangle = P_{1,1} + P_{-1,-1} - P_{1,-1} - P_{-1,1}.$$

Monesti kiinnostuksen kohteena on dikotomisat muuttujat, jotka ovat täydellisesti korreloituneita. Tosin voi olla esimerkiksi mittavirheen aiheuttamaa heittoa, jolloin liikutaan ääriarvojen välillä. Vaikka kvanttikorrelaatio poikkeaa tavallisesti korrelaatiosta, näillä ei ole eroa, kun muuttujien A ja B odotusarvot ovat nolliä.

3.2 Tilastotieteellinen riippumattomuus

Perinteinen todennäköisyysteorian määritelmä tilastotieteelliselle riippumattomuudelle ei ole riittävä, tai tehokas, käsiteltävien kvanttiteorian ongelmien kannalta. Tarkemmin sanoen se ei kerro milloin pitäisi olettaa riippumattomuus ja milloin yhteisjakaumaa ei ole olemassa. Moderni todennäköisyysteoria perustuu pitkälti 1930-luvulla Andrey Kolmogorovin kehittämiin aksioomiin, jotka luovat mittateoriaan perustuvan pohjan todennäköisyyslaskennalle. Kritiikkinä Kolmogorovin mallille voidaan sanoa, että se pitää tilastollista riippumattomuutta matemaattisena sattumana, eikä fundamentaalisenä suhteena. Jos teet tänään nopanheittokeksen, ja seuraavana päivänä toisen vastaavan keksen, ei ole järkevää testata keksien riippumattomuutta riippumattomien tapahtumien kertolaskusäännöllä. Päin vastoin, kokeet tiedetään rakenteellisesti toisistaan riippumattomiksi, eikä niille ole järkevää asettaa yhteisjakaumaa, mikä tarvittaisiin kertolaskusäännön käyttöön. Nyt on tehtävä selvä ero tilastollisen riippumattomuuden (stochastic independence) ja stokastisen erillisyyden (stochastic unrelatedness) kanssa. Jotta muuttujat olisivat tilastollisesti riippumattomia, on niiden matemaattisesti kuuluttava samaan avaruuteen. Toisin sanoen mittausten tapauksessa, näiden täytyy tapahtua samanaikaisesti tai muuten olla jotenkin liitettävissä toisiinsa. Satunnaismuuttujia, joilla ei ole tekemistä toistensa kanssa, eli stokastisesti erillisiä satunnaismuuttujia, ilmenee myöskin perinteisessä Kolmogorovilaisessa todennäköisyysteoriassa, mutta näiden välille ei ole määritelyä minkäänlaisia kytköksiä tai funktioita.[4],[7],[9]

Esimerkki 1. Nopan heitto

Otetaan esimerkiksi pari yksinkertaista nopanheittokeksia. Ensiksi heitetään yhtä noppaa monta kertaa peräkkäin. Tuloksista saadaan kaksi satunnaismuuttujaa seuraavasti:

$$A = \begin{cases} 1 & \text{jos silmäluku on pariton} \\ 0 & \text{muulloin} \end{cases},$$

$$B = \begin{cases} 1 & \text{jos silmäluku on neljä tai suurempi} \\ 0 & \text{muulloin} \end{cases}.$$

Nyt muuttujat selvästi tapahtuvat samanaikaisesti (co-occur), koska ne kuvaavat samaa nopan heittoa. Muuttujille A ja B saadaan mitta-arvot aina parittain samanaikaisesti. Toisin ajatellen muuttujat ovat saman taustamuuttujan Z funktioita, joka tässä tapauksessa on nopanheiton tulos. Joka tapauksessa havaintojen perusteella voidaan arvioida todennäköisyydet $P(A = 1 \cap B = 1)$, $P(A = 1)$ ja $P(B = 1)$. Jos yhteistodennäköisyys saadaan yksittäisten todennäköisyyksien tulona, voidaan todeta muuttujat toisistaan riippumattomiksi. Tätä riippumattomuutta

ei voida todeta ennalta, sillä se riippuu nopan painotuksesta. Painottoman nopan tapauksessa A ja B ovat tilastollisesti riippuvia. Riippumattomuus taas tulisi esimerkiksi nopalla joka on painotettu tavalla:

$$\begin{array}{l} \text{silmluku} \quad : \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad 5 \quad 6 \\ \text{todennäköisyys} : \quad 0 \quad \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4} \quad \frac{1}{4} \quad 0 \end{array} .$$

Sama logiikka pätee jos heitetään kahta noppaa samaan aikaan, ja otetaan mitaukset A ja B eri nopista. Mittaukset tapahtuvat yhdessä parittain, voidaan niille luoda yhteisjakauma ja saadaan riippuvuus selville kertolaskusäännön avulla. Toisaalta voidaan erottaa heitot eri aikoihin. Muuttuja A mittaa maanantaina heitettyjen noppien tuloksia, ja muuttuja B saa arvot tiistain heitoista. Edelleen saadaan laskettua $P(A = 1)$ ja $P(B = 1)$, mutta nyt emme voi estimoida arvoa $P(A = 1 \cap B = 1)$. Muuttujia A ja B ei ole mitattu pareittain, eikä koeasetelma tarjoa mitään selvää tapaa mikä maanantain heitto liitetään mihin tiistain heittoon. Muuttujilla ei siis ole olemassa yhteisjakaumaa, niitä ei voida esittää saman taustamuuttujan funktiona. Tosin nyt voidaan todeta, että muuttujat ovat toisistaan riippumattomat a priori. Täten voidaan väittää $P(A = 1 \cap B = 1), P(A = 1)$ olevan tulosäännön mukainen muuttujien konstruktion takia. Tätä ei tarvitse empiirisesti todistaa, eikä tätä voi empiirisellä datalla osoittaa vääräksi. Jos nämä muuttujat sattuvat korreloimaan, se ei vaikuta a priori tietoon, että muuttujilla ei ole mitään tekemistä toisensa kanssa, eli mahdollinen otoskorrelaatio on vain sattumaa.

Nyt jossain tapauksessa riippumattomuuden oletus mahdollistaa kertolaskusäännön paikkansapitävyyden ja toisessa tapauksessa kertolaskusääntö määrittää riippumattomuuden. Tämä epäkohta saadaan poistettua Cbd-teorian mallissa, jossa tulkitaan tilastollinen riippumattomuus mahdolliseksi vain muuttujille, joille on määriteltävissä yhteisjakauma. Muuttujat, jotka sijaitsevat eri mitta-avaruuksissa, eivät voi olla tilastollisesti riippuvaisia tai riippumattomia. Niillä ei ole luontaista määriteltävää yhteisjakaumaa.[7]

4 Kvanttimekaniikan katselmus

Kvanttimekaniikan teoriat ja ongelmat eivät itse ole tämän työn pääpainona tai tarkoituksena. Kvanttifysiikka on tässä työssä mielenkiinnon kohteena oleva sovelluskohde, joten on tarpeellista tutustua hieman kvanttimekaniikan saloihin, jotta itse tutkittavan teorian tarkoitus selvenisi. Kvanttimekaniikkaa voidaan pitää ainoana alueena jossa havaitaan aitoa epäkontekstuaalisuutta. Teoria voidaan toki esittää puhtaasti matemaattisena konstruktiona, mutta jos halutaan jokin käytännön sovellus teorialle, tarvitsee meidän käsitellä kvanttifysiikan aineistoja tai generoida vastaavanlaisia aineistoja, jotka käyttäytyvät hyvin erikoisella tavalla.

Lähtökohtana on klassisten fyysikoiden ja kvanttifysikoiden välinen filosofinen kiista siitä, että onko todellisuus deterministinen vaiko todennäköisyyksiin pohjautuva. Tästä päädytään siihen, että tilastotieteilijät joutuvat mallintamaan satunnaisu- muuttujien välistä voimakasta korrelaatiota, kun fyysikot ovat tietyissä tapauksissa voineet todeta nämä täysin toisistaan riippumattomiksi, ja kieltävät tausta- ja piilomuuttujien käytön. Varsinkin silloin, kun ei voida vedota samasta lähteestä saatuun informaatioon. Täten siis mielenkiinnon varsinaisena kohteena ei ole itse kvanttiteoria, vaan kvanttiteorian ja klassisen fysiikan välinen ristiriita. Siis tilastotieteilijän kannalta juuri ristiriidan aiheuttamat mallinnusongelmat nousevat mielenkiinnon kohteeksi.

Huomioitavaa on, että keskustelu kvanttifysiikan ja klassisen fysiikan välillä on hyvin teoreettista ja jokseenkin joustavaa tai ristiriitaista. Monia teorioita ei ole todistettu ja niille yleensä löytyy vain tukevaa todistusaineistoa. Eri fyysikot voivat suosia hieman eri teorioita, joten ei voida antaa vahvoja väitteitä siitä, mitä kvanttifysikot ovat mieltä tästä asiasta ja mitä klassisen fysiikka väittää tästä ongelmasta. Esimerkiksi ongelma tiedon teleportaatiosta, joka esiintyy lomittuneiden hiukkasten kanssa, on yleisesti kvanttifysiikan kannalta pidetty todellisena ilmiönä. Toisaalta osa kvanttifysikoista ovat sitä mieltä, että varsinaista informaatiota ei välity lomittuneiden hiukkasten välillä. Moneen kvanttifysiikan teoriaan löytyy vaihtoehtoisia teorioita, joten jokaista seuraavaa väitettä kvanttifysiikasta ei voida ottaa universaalina totuutena fyysikoiden keskuudessa. Tämä ei poista tarvetta reaalisten mittaustulosten mallinnukseen.

4.1 Heisenbergin epätarkkuusperiaate

Vuonna 1927 Werner Heisenberg esitti kuuluisan kvanttimekaniikan peruseriaate- teorian, joka tunnetaan Heisenbergin epätarkkuusperiaatteena. Teorian mukaan kvanttimekaniikassa joitain observaabelipareja ei voida samanaikaisesti määrittää äärettömän tarkasti. Esimerkkinä tällaisesta parista toimii hiukkasen paikka x ja liikemäärä p . Jos hiukkasen paikka halutaan määrittää tarkasti, silloin liikemäärän epävarmuus kasvaa samassa suhteessa. Tämä ominaisuus noudattaa kaavaa:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{h}{2},$$

jossa h on Planckin vakio. Tämä ei ainoastaan vaikuta mittaustulosten tarkkuuksiin, vaan myös kuinka suurilla vaihteluilta arvot voivat saada käytännössä. On teo-

rioitu, että tämän periaatteen mukainen käytös estää muun muassa neutronitähtiä luhistumasta.

Kiinnostuksen kohteena on nyt ensin mainitut käytännön mittaukset. Kvanttifiysiikan ja klassisen fysiikan näkökulmasta löytyy eri selitykset ilmiölle. Niin kuin aikaisemmin todettiin, kvanttimekaniikan näkökulmasta todellisuus perustuu osittain todennäköisyyksiin, eli aitoa satunnaisuutta on olemassa. Hiukkasen paikan epävarmuus ei ole suoranaisesti tiedon puutetta hiukkasen paikasta, vaan hiukkasen sijainti voi oikeasti olla jakautunut tietylle alueella samanaikaisesti. Alkeishiukkanen voi sijaita monessa eri paikassa samanaikaisesti. Tätä systeemin ominaisuutta kutsutaan kvanttisuperpositioksi. Kun hiukkasen paikka mitataan tai määritetään, hiukkanen pakotetaan ilmaantumaan johonkin, mikä muuttaa hiukkasen tilaa. Paikan mittaukset eivät siis ole vain ”kuvia” siitä missä hiukkanen kulkee, vaan aktiivisia muutoksia hiukkasen olotilaan. Vastaavasti klassinen deterministinen näkökulma olettaa, että hiukkasella on aina tietty paikka ja liikemäärä. Heisenbergin epätarkkuusperiaate on tästä näkökulmasta tilastotieteellinen mittaongelma, eikä molempia arvoja vain pystytä mittaamaan tarkasti samanaikaisesti. Deterministinen näkökulma sanoo, että tarkat arvot x ja p ovat olemassa, mutta nykyisillä mittauksilla tulee epävarmuutta σ_x ja σ_p verran. Kvanttimekaniikan mukaan σ_x ja σ_p kuvaavat hiukkasen oikeaa olotilaa, ja mitatut arvot x ja p ovat pakotettuja tiloja, jotka eivät vastaa hiukkasen oikeaa alkuperäistä tilaa, vaan ovat tiloja joihin alkuperäinen superpositiotila luhistuu. Liikemäärä ja sijainti eivät ole ainoita hiukkasen ominaisuuksia jotka voivat olla superpositiotilassa. Esimerkiksi hiukkasen spin on yleinen mittauskohde kvanttifiysiikan tutkimuksissa. [14] [15]

4.2 Lomittuneet hiukkaset ja tiedon teleportaatio

Kvanttimekaniikassa lomittuminen on kahden tai useamman kvanttisysteemin, esimerkiksi hiukkasen, välinen ominaisuus. Kyseessä on tietynlainen epäklassinen korrelaatio. Kun hiukkasen jokin ennalta määräämätön ominaisuus mitataan, tullaan samalla määränneeksi sen lomittuneen parin vastaava ominaisuus. Kyseessä on niin sanottu tiedon teleportaatio, koska vaikutus on välitön etäisyydestä riippumatta. Lomittuneita hiukkasia ei pidä ajatella kahtena hiukkasena, jotka ovat jotenkin liittyneet toisiinsa jonkin ominaisuuden vaikutuksesta. Kyseisiä hiukkasia olisi parempi tarkastella osina yhdestä ja samasta entiteetistä. Lomittunutta systeemiä ei voida kuvata molempien hiukkasten kvanttitilojen summana, vaan molemmat ovat osia samasta yhtenäisestä kvanttitalasta, joka on jakautunut kahteen eri paikkaan. Mittattaessa tiettyjä ominaisuuksia, kuten sijaintia, momenttia tai spiniä, hiukkasten tilat näiden osalta ovat superpositiotilassa, jossa hiukkaset saavat monia arvoja samanaikaisesti. Yhtä hiukkasta mitattaessa superpositiotila luhistuu yhdeksi tilaksi, josta saadaan mittaustulos. Lomittuneessa tapauksessa molemmat hiukkaset luhistuvat samanaikaisesti ja saavat korreloivat arvot. Esimerkiksi spin-mittauksissa hiukkasten superpositiot voivat luhistua tietyn akselin suuntaan aina vastakkaisiksi spinneiksi. Tärkeintä tässä ominaisuudessa on juuri samanaikaisuus kahdessa eri sijainnissa. Kuten sanottu, edes informaatio ei klassisessa mielessä saisi liikkua valoa nopeampaa, mutta nyt on havaittavissa välitön vaikutus valoa nopeampaa kahden pisteen välillä. Toisaalta vaikka fyysikot eivät usko varsinaista informaation siirty-

mistä tapahtuvan lomittuneiden hiukkasten välillä, voi kvanttitalan muutos tapahtua välittömästi etäisyydestä riippumatta, ja kvanttikorrelaatiota ja sen mahdollista hyödyntämistä pidetään laajemmin todellisena. Kvanttikorrelaation tutkimuksen alkuaikoina yksi tärkeimmistä kysymyksistä oli, onko vaikutus välitön vai valon nopeutta hitaampi. Nykyisillä testeillä on lomittuneet hiukkaset voitu mitata riittävän suurella tarkkuudella ja etäisyydellä toisistaan, jotta korrelaatiota ei voida suoraan selittää valon nopeudella kulkevalla tiedon siirrolla.

Superpositiotila on tilastotieteen näkökulmasta filosofisesti mielenkiintoinen ilmiö. Yleisesti tilastotiede käsittelee reaali maailman asioita luoden näille malleja, mittareita ja arvioita. Tarkoituksena on saada malleja ja tuloksia, jotka ovat hyödyllisiä. Tilastotieteelliset mallit ovat usein epäeksakteja, esimerkiksi luonnossa olevien kukkien terälehtien pituuksia voidaan tarkastella normaalijakauman avulla. Voidaan saada nätti sopiva jakauma, ja sen avulla joitain hyödyllisiä estimaatteja. Tosin normaalijakauma ei ole eksaktisti oikein, jos oletetaan ettei jokin jumala revi kukkien terälehtien mittoja jostain konkreettisesta jakaumasta. Samoin kolikon heitto voidaan tilastotieteessä kuvata ”fifty-fifty”-tyylisesti, mutta luonnossa ei luultavasti ole, eikä tule olemaan, yhtään täydellisesti tasapainotettua kolikkoa. Samoin maailman kaikkeuden synnyn ja mahdollisen lopun välillä tapahtuneet kolikon heitot eivät välttämättä mene kruunan ja klaavan välillä tasan. Metafyysisesti tätä voidaan ajatella Platonin ideaopin kannalta. Platonilaisen ajattelun kannalta teoreettiset jakaumat ovat todellisia, ja reaali maailman jakaumia seuraavat ilmiöt ovat vain vääristymiä näistä. Moderni luonnontiede tosin noudattelee enemmän Aristoteleen ajatustapaa, missä painotetaan reaali maailman ilmiöiden tutkimista. Tilastotieteelliset aineistot ovat todellisuutta, ja tilastotieteen mallit ovat teoreettisia arvioita, joiden halutaan olevan hyödyllisiä, mutta niiden ei tarvitse olla eksakteja.

Kvanttimekaniikka kääntää tämän ympäri. Alkeishiukkanen voi sijaita monessa paikkaa saman aikaisesti. Kaksoisrakokokeessa hiukkanen voi kulkea kahdesta välistä samanaikaisesti. Kyseessä on todellinen reaali maailman jakautuma. Reaali maailman tapahtumat eivät vain noudata suurin piirtein jotain teoreettista jakaumaa, tai tapahtu tietyllä arvioidulla todennäköisyydellä. Alkeishiukkasilla on superpositiotila oikeana olotilanaan. Nyt tilastotieteen tekniikat mallintavat todellista reaali maailman rakennetta, olettaen kvanttiteorian paikkansa pitävyyden. Jos alkeishiukkasen superpositiotilaa mallinnetaan jakaumalla, kysymyksenä ei ole onko jakauma tarkka, harhainen tai hyödyllinen. Kysymyksenä on, onko jakauma oikea eksakti rakenne superpositiotilalle. Todennäköisyysteoriaa ei voida vain soveltaa kvanttimekaniikan tutkimustuloksiin, koska kvanttimekaniikan maailmankuva ei ole deterministinen, vaan perustuu todennäköisyyksiin. Tämän takia perinteinen tilastotieteen filosofia ei sovi kvanttiteoreettisiin ongelmiin, tai ainakin vaaditaan tarkempaa päätöksentekoa siitä miten eri teorioita sovelletaan. [14] [15]

4.3 Taustamuuttujamallit

Niin kuin edellä todettiin, kvanttifysiikka pitää todellisuutta todennäköisyyksiin perustuvana. Heisenbergin epätarkkuusperiaate on tästä hyvä esimerkki, koska tämä pakottaa epävarmuuden, jota ei voida koskaan deterministisesti selittää. Klassiset fyysikot tosin uskovat, että kvanttimekaniikka on puutteellinen teoria. Kaikelle epä-

varmuudelle löytyy deterministinen pohja, mutta sitä vain ei vielä tunneta. Esi-merkiksi hiukkasen sijainnin vaihtelua voidaan ajatella kaasupilvenä. Pilven jokai- sella hiukkasella on tarkka deterministinen sijainti ja liikemäärä, vaikka niitä ei paljaalla silmällä nähdä, tai ei pystytä kaikkia saman aikaisesti tarkkaan mittaama- an. Kuuluisin haaste kvanttimekaniikan teorian luonnetta vastaan on Einstein- Podolsky-Rosen-paradoksi (EPR-paradoksi). Tämä yrittää perustella kvanttimeka- niikan epätäydellisyyttä[6].

Taustamuuttujamallit ovat deterministisiä selityksiä kvanttimekaniikan ilmiöil- le. Yksi kuuluisimmista näistä malleista on De Broglie–Bohm-teoria. Teoria liittää partikkeleihin ohjaavan aallon, joka selittää sen käytöksen. Tällainen taustamuut- tujamalli, jos sellainen osoittautuisi paikkansa pitäväksi, kumoaisi tässä mielessä kvanttimekaniikan ja klassisen fysiikan ristiriidan. Ristiriitana siis maailmankaik- keuden rakenteen deterministisyys, ei nyt puututa kvanttigravitaatioon tai muihin ongelmiin. Jos jokin sopiva taustamuuttujamalli on olemassa, niin silloin kvanttie- pälokaalisuus voidaan mallintaa taustamuuttujien avulla, jolloin ei tarvita mitään Cbd-teorian tapaista ratkaisua. Spin-mittauksissa voitaisiin käyttää taustamuuttu- jia kuvaamaan lomittuneiden hiukkasten korrelaatiota[5].

4.4 Kochen-Speckerin lause ja Bellin lause

Muun muassa EPR-paradoksi aiheutti ja aiheuttaa keskustelua kvanttiteorian täy- dellisyydestä. Mahdollisen sopivan taustamuuttujateorian olemassaolo luo suuria metafysisiä kysymyksiä. Yksi ensimmäisistä vastauksista taustamuuttujamallien olemassaoloon antoi John Bell. Bellin lause perustelee, miksi lokaali taustamuuttu- jamalli ei sovi selittämään kvanttimekaniikan tuloksia. Bell kehitti joukon epäyhtä- löitä, mitä lokaalisten determinististen taustamuuttujamallien pitää noudattaa. Täl- lä tavoin metafyyminen ongelma saadaan siirrettyä fysikaalisesti testattavaksi. Käy- tännön kokeet antavat todistusaineistoa sille, että kvanttimekaaninen käytös rikkoo Bellin epäyhtälöitä, minkä takia taustalla ei voi olla lokaali taustamuuttujamalli. Bellin teoriaan on esitetty porsaanreikiä, mutta ainakin osa näistä on onnistuttu sulkemaan.

Seuraajana Bellin teorialle esitettiin Kochen–Speckerin lause. Missä Bell käytti lokaalisuuden tuottamaa rajoitusta hyväksi, Kochen-Speckerin lause käyttää kon- tekstuaalisuutta laajempänä rajoitteena, eikä suoranaisesti käyty lokaalisuutta hy- väkseen. Kochen-Speckerin lause perustelee, miksi mitään epäkontekstuaalista taust- tamuuttujateoriaa ei voida käyttää kuvaamaan kvanttimekaniikkaa kolmen tai useam- man ulottuvuuden Hilbertin avaruudessa[5],[11].

4.5 Legget-Garg ja KCBS

Bellin epäyhtälöiden jälkeen on johdettu muitakin uudempiä epäyhtälöitä, joita on käytetty taustamuuttujamallien sopimattomuuden perusteluun eri käytännön ko- keiden avulla. Tunnetuimpia näistä ovat Legget–Garg-epäyhtälöt ja Klyachko–Can- Binicioğlu–Shumvosky-epäyhtälöt, joita vastaavaan periaatteeseen itse Cbd-teorian yhtälöt osittain perustuvat, sillä LG- ja KCBS-epäyhtälöt ovat näiden epäyhtälöiden erikoistapauksia. Yksinkertaisin esimerkki LG-epäyhtälöstä(Legget–Garg) on tapaus

kolmesta peräkkäisestä dikotomisesta ($Q \in \{-1, 1\}$) mittauksesta, jotka suoritetaan peräkkäin, ajankohtina $t_1 < t_2 < t_3$. Oletetaan, että mittaukset ajankohtina t_1 ja t_3 korreloivat täydellisesti ($C_{13} = 1$). Nyt saadaan toiselle mittaukselle kolme eri vaihtoehtoa. Voi olla että $C_{12} = C_{23} = 1$, jolloin kaikki kolme mittausta saavat aina saman arvon, eli saadaan mittaustulokset $(1, 1, 1)$ tai $(-1, -1, -1)$. Mahdollisesti $C_{12} = C_{23} = -1$, jolloin mittaustulos vaihtuu kahdesti, eli saadaan tulokset $(1, -1, 1)$ tai $(-1, 1, -1)$. On myös mahdollista, että toinen mittaus ei korreloi ensimmäisen ja kolmannen mittauksen kanssa. Ensimmäinen ja kolmas mittaus saavat aina saman arvon, mutta toinen mittaustulos on riippumaton. Määritellään $R = C_{12} + C_{23} - C_{13}$, joka saa äskeisissä tapauksissa arvot $R = 1, -1, -3$. Tästä päästään epäyhtälöön $R = C_{12} + C_{23} - C_{13} \leq 1$. Tähän systeemiin kuuluu oletukset, että muuttujilla Q_i on aina olemassa täsmällinen arvo, sekä että tehdyt mittaukset eivät muuta tätä arvoa, tai tulevia arvoja. Jos kyseistä LG-epäyhtälöä jossain tapauksessa rikotaan, voidaan olettaa että näitä oletuksia ei noudateta.

Idea KCBS-epäyhtälön takana on yhtä yksinkertainen. Olkoon numerot a_1, a_2, a_3, a_4 ja a_5 kaikki joko 1 tai -1 . Nyt aina pätee, että

$$a_1a_2 + a_2a_3 + a_3a_4 + a_4a_5 + a_5a_1 \geq -3.$$

Jos nyt oletetaan, että meillä on vastaavasti viisi dikotomista tulosta eri mittauksista, ja oletetaan näiden kaikille kombinaatiolle olevan määritely yhteisjakauma. Ottamalla yllä olevasta epäyhtälöstä puolittain odotusarvo, päästään seuraavaan kvanttikorrelaatioiden epäyhtälöön

$$\langle a_1a_2 \rangle + \langle a_2a_3 \rangle + \langle a_3a_4 \rangle + \langle a_4a_5 \rangle + \langle a_5a_1 \rangle \geq -3.$$

Epäyhtälön rikkominen tarkoittaisi, että mittauksille ei voida määrittää yhteisjakautumaa.

Tällaista käytöstä voidaan havainnollistaa yksinkertaisella kolikonheittokeella. Meillä on kolme kolikkoa, ja aina kun kahta näistä heitetään samanaikaisesti, saavat ne eri tuloksen. Kolikot ovat siis pareittain keskenään täydellisen negatiivisesti korreloituneita. Mitä tapahtuu kun kaikki kolme kolikkoa heitetään saman aikaisesti? Täytyy tapahtua jotain aikaisemmasta poikkeavaa. Kolmella kolikolla myös pätee:

$$\langle a_1a_2 \rangle + \langle a_2a_3 \rangle + \langle a_3a_1 \rangle \geq -1.$$

Kolme kolikkoa ei voi samanaikaisesti saada keskenään poikkeavat tulokset. Jos pareittain heitettynä kolikot rikkovat kyseistä epäyhtälöä, niiden käytös täytyy muuttua kun ne heitetään samanaikaisesti. Täten kolikoille ei voida määrittää sopivaa yhteisjakautumaa parittaisten testien perusteella. [10]

5 Konteksti

Kontekstilla tarkoitetaan eri olosuhteita tai tilanteita, joissa mittauksia suoritetaan. Määritellään satunnaismuuttujat ja tutkimusasetelma siten, että satunnaismuuttujat, olkoon nämä sitten mittauksia tai kysymyksiä, mitataan aina tietyssä kontekstissa. Olkoon Q joukko erilaisia suoritettavia mittauksia, C joukko eri konteksteja. Merkitään varsinaisia satunnaismuuttujia R_q^c . Satunnaismuuttujat identifioidaan sillä, mikä mittaus $q \in Q$ on kyseessä ja missä kontekstissa $c \in C$ se on suoritettu.

Mittaukset Q voivat olla esimerkiksi psykologisessa tutkimuksessa kysytyjä kysymyksiä ja kontekstit $C = \{1, 2\}$ voisivat kuvata suoritettiin kysely koehenkilöltä kirjallisesti vai suullisesti. Ideana on että mittaukset suoritetaan ryhmissä tai pareittain, eli samalta henkilöltä kysytään vaikka kolme kysymystä ja saadaan havaintoarvot muuttujille (R_1^1, R_2^1, R_3^1) . Nämä mittaukset selvästi riippuvat toisistaan ja niillä on olemassa yhteisjakauma ja mittausten joukkoa voidaan käsitellä yhtenä satunnaismuuttujana. Nyt meillä on tässä esimerkissä kaiken kaikkiaan kuusi satunnaismuuttujaa:

$$R_1^1, R_2^1, R_3^1, R_1^2, R_2^2, R_3^2,$$

selvemmin merkittynä:

$$(R_1^1, R_2^1, R_3^1), (R_1^2, R_2^2, R_3^2).$$

Määrätään, että kontekstien välillä ei ole yhteisjakauksia. Oletetaan että $c = 1$ tarkoittaa suullista kyselytutkimusta ja $c = 2$ kirjallista, ja joka henkilölle kysymykset esitetään vain toisessa muodossa. Nyt siis todennäköisyydellä, että $[R_1^1 = x, R_2^2 = y]$ ei ole olemassa mitään järkevää tulkintaa, koska tällaista tapausta ei ole olemassa kyseisessä tutkimuksessa. Toisaalta voitaisiin samalta henkilöltä kysyä ensimmäinen kysymys suullisesti ja toinen kirjallisesti, jolloin voitaisiin tulkita nämä toisistaan riippuviksi. Tämän takia onkin tärkeää painottaa, että alussa määrättiin kontekstit toisistaan eriäviksi. Esimerkin tapauksessa kysymykset suoritetaan yhdeltä henkilöltä aina kaikki joko kirjallisesti tai suullisesti. Tästä varsinainen teoria saa osittain nimensä, sillä kontekstuaalisuus muodostuu triviaalisti, kun satunnaismuuttujat määritellään tällä tavalla. Tarkemmin sanottuna teorian nimi tulee siitä, että jokainen mittaus voidaan ajatella tapahtuvan omassa kontekstissaan. Yleensä kontekstien välistä erillisyyttä ei tarvitse keinotekoisesti pakottaa, vaan monesti se kuuluu rakenteellisesti mittaukseen. Esimerkiksi potilailta tehtäviltä mittauksilta kontekstina voisi olla se, onko potilaalle annettu lääkettä vai lumeläkettä. Kontekstit ovat nyt keskenään toistensa poissulkevat, ja yhteistodennäköisyydet ovat nyt ei-määriteltyjä, jos ajatellaan sekä lääkkeen että lumeläkkeen antaminen samalle potilaalle mahdottomaksi tapaukseksi.[12],[13]

6 Kytkennät

Kytkentä on kahden tai useamman satunnaismuuttujan yhdistelmä, jonka tarkoituksena on yleensä havainnoida näiden jakaumien samankaltaisuuksia tai itse muuttujien välistä yhteyttä. Kytkennät ovat joskus itse kiinnostuksen kohteena, jos ne sopivat rakenteellisesti tutkimuksen aiheena olevan riippuvuuden havainnointiin. Useimmin tosin kytkentöjä käytetään vain teknisenä välineenä, sillä ne osoittautuvat hyödyllisiksi työkaluiksi monissa todistuksissa. Tämän työn osalta kytkentöjä käytetään hyödyksi siten, että kontekstien välille voidaan pakottaa yhteisjakauma, vaikka sellaisia ei ole määritelty. Näin voidaan kuvata kvanttikontekstuaalisuutta, kuitenkin erottuen normaalista lineaarisesta riippuvuudesta. Kuten ennalta sanottu, kontekstien välillä ei ole stokastista riippumattomuutta, eikä varsinaisia yhteisjakaumia. Kytkennällä luotu mielivaltainen yhteisjakauma ei muuta tätä ominaisuutta.

Kun kaksi satunnaismuuttujaa kytketään pariin, luodaan muuttujista ensin samoin jakautuneet kopiot ja nämä muodostavat itse varsinaisen kytkennän. Satunnaismuuttujista A ja B luodaan kopiot

$$\tilde{A} \stackrel{D}{=} A, \tilde{B} \stackrel{D}{=} B,$$

jotka muodostavat kytkennän (\tilde{A}, \tilde{B}) , missä merkintä $a \stackrel{D}{=} b$ tarkoittaa, että satunnaismuuttujat ovat samoin jakautuneita. Kyseiset kopiot ovat muuttujien yksittäisiä kopioita, eikä koko muuttujajoukkoa kopioida kerralla. Täten vaikka kopiot ovat samoin jakautuneita, kopioiden väliset yhteisjakaumat voivat erota alkuperäisten muuttujien yhteisjakaumista. Samoin muuttujien tapauksessa jossa ei ole määritelty yhteisjakaumaa, voidaan niiden kopioille valita sopiva yhteisjakauma. Yksinkertaisin kytkennän muoto on itseis-kytkentä (self-coupling), mikä tarkoittaa suoraan kopioiden luomista alkuperäisestä muuttujasta ja näiden kytkennästä.[8]

6.1 Yhtenevä ja epäyhtenevä liitos

Systeemissä samaa ominaisuutta kuvaavat muuttujat eri konteksteissa ovat aina toisistaan stokastisesti erilliset ja nämä satunnaismuuttujat on tarkoitus liittää kytkennöillä. Systeemiä, jonka kaikki samaan ominaisuuteen $q \in Q$ liittyvät muuttujat ovat samoin jakautuneita, kutsutaan yhtenevästi liitettyksi. Kytkentöjä tarkasteltaessa yhtenevissä tapauksissa on mahdollista, että ääritapauksessa kytketyt muuttujat saavat täysin samat arvot joka tilanteessa. Tällöin kyseessä olisi epäkontekstuaalinen systeemi, jos kyseessä olisi kytkentä eri kontekstien välillä. Tosin epäyhtenevän liitoksen tapauksessa ei ole mahdollista, että löytyy kytkennällä luotu yhteisjakauma, jossa muuttujat saavat aina saman arvon. Koska muuttujilla on eri jakaumat epäyhtenevässä tapauksessa, ei niiden kaikille arvoille voi löytyä sopivia pareja.

Epäkontekstuaalisuuden osoittamiseksi halutaan löytää kytkentä, joka osoittaisi kontekstin merkitsemättömäksi, mutta tämä onnistuu suoraan vain yhtenevässä tapauksessa. Tämä tulee ongelmalliseksi käytännön tutkimuksissa, sillä teoreettisesti yhtenevissä tapauksissa usein tapahtuu koeasetelmiin liittyviä harhoja tai fyysisiä vaikutuksia, joiden takia muuttujien jakaumat eivät osu täysin identtisiksi. Tämän takia täytyy löytää keino eriävien jakaumien sallimiseksi kontekstien välillä, joten

halutaan tapa osoittaa epäkontekstuaalisuus myös epäyhtenevissä systeemeissä. Tämä onnistuu maksimaalisen kytkennän avulla.[2],[8]

6.2 Maksimaalinen kytkentä

Olkoon $X_i, i \in \mathbb{I}$ joukko diskreettejä satunnaismuuttujia. Muodostetaan kytkentä, jossa nämä muuttujat vastaavat toisiaan maksimaalisesti. Olkoon $(\tilde{X}_i, i \in \mathbb{I})$ joukon X_i kytkentä. Olkoon C kytkentätapahtuma, jonka sattuessa kytkennän \tilde{X}_i muuttujat saavat yhtä suuren arvon. Toisin sanoen:

$$C \subseteq \{\tilde{X}_i = \tilde{X}_j, \forall i, j \in \mathbb{I}\}.$$

Oletetaan, että muuttujat X_i saavat arvoja äärellisestä joukosta E . Määritellään todennäköisyysfunktio p_i , arvolle $x \in E$:

$$P(X_i = x) = p_i(x).$$

Kaikille $i, j \in \mathbb{I}$ ja $x \in E$ saadaan

$$P(\tilde{X}_i = x, C) = P(\tilde{X}_j = x, C) \leq p_j(x),$$

ja tästä saadaan kaikille $i \in \mathbb{I}$

$$P(\tilde{X}_i = x, C) \leq \inf_{j \in \mathbb{I}} p_j(x).$$

Nyt summaamalla yli $x \in E$:n, saadaan seuraava haluttu tulos.

Lause 1.

Jos C on diskreettien satunnaismuuttujien $X_i, i \in \mathbb{I}$, kytkentätapahtuma ja muuttujat X_i saavat arvoja äärellisestä joukosta E , niin silloin

$$P(C) \leq \sum_{i \in \mathbb{I}} \inf_{x \in E} p_i(x). [8]$$

Seuraavaksi muodostetaan kytkentä kytkentätapahtumalla C , jolla äskeinen lause saa yhtäsuuruuden. Tätä tapausta kutsutaan maksimaaliseksi kytkennäksi, ja samassa yhteydessä muuttujaa C kutsutaan maksimaaliseksi kytkentätapahtumaksi. Määritellään maksimaalinen kytkentätodennäköisyys:

$$c := \sum_{i \in \mathbb{I}} \inf_{x \in E} p_i(x).$$

Ääripäät ovat nyt triviaaleja tapauksia. Määritellään että jos $c = 0$, niin \tilde{X}_i ovat toisistaan riippumattomat, ja $C = \emptyset$. Jos taas $c = 1$, niin määritellään että \tilde{X}_i ovat keskenään identtiset, ja C on koko otosavaruus. Tarkastellaan seuraavaksi tapausta $0 < c < 1$. Olkoon I, V ja $W_i, i \in \mathbb{I}$ riippumattomia satunnaismuuttujia, siten että $I \in \{0, 1\}$, ja

$$P(I = 1) = c, P(V = x) = \inf_{i \in \mathbb{I}} p_i(x)/c$$

ja

$$P(W_i = x) = (p_i(x) - cP(V = x))/(1 - c), x \in E.$$

Määritellään kaikille $i \in \mathbb{I}$, että

$$\tilde{X}_i = \begin{cases} V & \text{jos } I = 1, \\ W_i & \text{jos } I = 0. \end{cases}$$

Tästä seuraa, että

$$\begin{aligned} P(\tilde{X}_i = x) &= P(V = x)P(I = 1) + P(W_i = x)P(I = 0) \\ &= P(X_i = x). \end{aligned}$$

Nyt $C = \{I = 1\}$ ja $P(C)$ saa arvon c . Tästä päästään seuraavaan tulokseen.

Lause 2.

Oletetaan, että X_i on joukko diskreettejä satunnaismuuttujia, jotka saavat arvoja äärellisestä joukosta E . On olemassa maksimaalinen kytkentä, eli kytkentä kytkentätapahtuman C :n kanssa siten että:

$$P(C) = \sum_{x \in E} \inf_{i \in \mathbb{I}} p_i(x). [8]$$

Esimerkki 2. Parittaiset fotonit

Käydään läpi esimerkki kvanttifysiikan puolelta, mikä havainnollistaa miksi kytkentöjä tai konteksteja on mielekästä tai tarpeellista yleensäkin käyttää. On suoritettu koe, jossa kalsiumista on saatu lähetettyä fotoneja pareittain eri suuntiin. Molempiin suuntiin on asetettu mittalaitteet, joilla mitataan fotonien polarisaatio, joka saa dikotomisen tuloksen riippuen mittauksen ortogonaalisesta kulmasta hiukkaseen liikkeeseen nähden. Nyt kun mittalaitteet asetetaan samaan mittauskulmaan, saavat laitteet pareittain aina saman tuloksen. Tämä ei päde jos mittaukset suoritetaan pareittain eri kulmissa. Jos ensimmäistä laitetta käännetään 30° astetta, mittatulokset saavat saman arvon noin 75% todennäköisyydellä. Samoin jos ensimmäinen laite pidetään alkuperäisessä 0° kulmassa ja toinen laite käännetään vaikka -30° kulmaan. Jos taas ensimmäinen laite pidetään 30° kulmassa ja vastaavasti toinen laite -30° kulmassa, saavat laitteet saman tuloksen 25% todennäköisyydellä. Tässä tapauksessa siis laitteiden kulmalla on yhteensä 60° ero.

Jos oletetaan hiukkasten käyttäytyvän edellä mainitulla tavalla, voidaan systeemiä mallintaa seuraavasti:

$$\begin{cases} X = \text{polarisaatio tapauksessa, missä mittauslaite on suorassa} \\ Y = \text{vasemman partikkelin polarisaatio, mittalaite on } 30^\circ \text{ kulmassa} \\ Z = \text{oikean partikkelin polarisaatio, mittalaite on } -30^\circ \text{ kulmassa} \end{cases}$$

$$P(Y = X) = P(X = Z) = 3/4, P(Y = Z) = 1/4.$$

Nyt todennäköisyyden laskusäännöillä saadaan:

$$\begin{aligned}
 P(Y = Z) &\geq P(Y = Z, X = Z) \\
 &= P(Y =, X = Z) \\
 &= P(Y = X) - P(Y = X, X \neq Z) \\
 &\geq P(Y = X) - P(X \neq Z) \\
 &= P(Y = X) + P(X = Z) - 1,
 \end{aligned}$$

eli $P(Y = Z) \geq P(Y = X) + P(X = Z) - 1$, josta seuraa $1/4 \geq 1/2$. Empiirisistä faktoista päästään nähtävästi ristiriitaan käyttämällä perustodennäköisyys laskuja. Todennäköisyyslaskennan kannalta tästä tulee epämukavaa, kun vielä kvanttimekaniikan laskut ennustavat samat arvot:

$$P(Y = X) = \cos^2 30^\circ = 3/4$$

$$P(Y = Z) = \cos^2 60^\circ = 1/4.$$

Havaittu ristiriita tosin katoaa, kun pysytään ”mittaustasolla”, eli kun käsitellään eri mittaus vaihtoehtoja erikseen. Käsitellään kolmea eri mittaustapaa, jossa ensimmäisessä on laite yksi kulmassa, toisessa laite kaksi on kulmassa, ja tapauksessa kolma molemmat mittauslaitteet on asetettu 30° kulmaan. Nyt voidaan tapausta yksi mallintaa tavalla:

$$\begin{cases}
 X_1 = \text{havaittu oikean partikkelin polarisaatio, kun laite on suorassa} \\
 Y_1 = \text{havaittu vasemman partikkelin polarisaatio, mittalaite on } 30^\circ \text{ kulmassa.}
 \end{cases}$$

Tiedetään siis, että nämä saavat samoja arvoja 75% todennäköisyydellä. Tiedetään myös, että arvoja $\{1, -1\}$ saadaan yhtä paljon molemmilla puolilla. Nyt voidaan määritellä yhteistodennäköisyydet muuttujille seuraavasti:

$$P(X_1 = -1, Y_1 = -1) = P(X_1 = 1, Y_1 = 1) = 3/8$$

$$P(X_1 = -1, Y_1 = 1) = P(X_1 = 1, Y_1 = -1) = 1/8.$$

Tämä sopii tunnettujen todennäköisyyksien kanssa, sillä

$$\begin{aligned}
 P(Y_1 = -1) &= P(X_1 = -1) \\
 &= P(X_1 = -1, Y_1 = -1) + P(X_1 = -1, Y_1 = 1) \\
 &= 1/2.
 \end{aligned}$$

Ja samoin

$$\begin{aligned}
 P(Y_1 = X_1) &= P(X_1 = -1, Y_1 = -1) + P(X_1 = 1, Y_1 = 1) \\
 &= 3/4.
 \end{aligned}$$

Täysin vastaavat tulokset saadaan, kun mallinnetaan mittaus vaihtoehtoa kaksi, missä

$$\begin{cases} X_2 = \text{havaittu vasemman partikkelin polarisaatio, kun laite on suorassa} \\ Z_2 = \text{havaittu oikean partikkelin polarisaatio, mittalaite on } -30^\circ \text{ kulmassa.} \end{cases}$$

Viimeisenä mittaus vaihtoehto kolme, jossa

$$\begin{cases} Y_3 = \text{havaittu vasemman partikkelin polarisaatio, mittalaite on } 30^\circ \text{ kulmassa} \\ Z_3 = \text{havaittu oikean partikkelin polarisaatio, mittalaite on } -30^\circ \text{ kulmassa.} \end{cases}$$

Nyt mittaukset saavat samat arvot vain 25% todennäköisyydellä, mutta edelleen arvoja $\{1, -1\}$ saadaan keskimäärin yhtä paljon molemmilla mittalaitteilla. Nyt yhteisjakaumat voidaan määrittää:

$$\begin{aligned} P(Y_3 = -1, Z_3 = -1) &= P(Y_3 = 1, Z_3 = 1) = 1/8 \\ P(Y_3 = -1, Z_3 = 1) &= P(Y_3 = 1, Z_3 = -1) = 1/8. \end{aligned}$$

Myös tämä sopii yhteen tunnettujen todennäköisyyksien kanssa. Jokainen eri mittaustapa ollaan pystytty mallintamaan ilman ristiriitaa. Ristiriita syntyy kun oletetaan, että partikkeleilla on polarisaatio suunnissa joissa niitä ei ole mitattu. Nyt päästään käsiksi kytkentöihin, ja miten niitä voidaan soveltaa kvanttimekaanisissa ongelmissa. Ollaan luotu parit (X_1, Y_1) , (X_2, Z_2) ja (Y_3, Z_3) . Nyt on osoitettu, että ei ole olemassa kytkentää (X, Y, Z) , joka noudattaisi jokaisen muuttujan tunnettuja todennäköisyyksiä. Toisin sanoen ei voida muodostaa yhteisjakaumaa (X, Y, Z) siten, että

$$(X, Y) \stackrel{D}{=} (X_1, Y_1), \quad (X, Z) \stackrel{D}{=} (X_2, Z_2) \text{ ja } (Y, Z) \stackrel{D}{=} (Y_3, Z_3).$$

Kvanttiteorian mukaan partikkelin polarisaatiota ei voida mitata monessa eri kulmassa saman aikaisesti. Kyseisessä mittauksessa saadaan parittaisia arvoja vain, koska mittauksessa käytetään kahta partikkelia kerralla. Havaittu ristiriita viittaa siihen, että mikrotasolla polarisaatiota ei ole sellaisenaan olemassa, vaan se ilmaantuu vain mittauksen yhteydessä makrotasolla. Samoin perinteinen Kolmogorovin aksioomiin perustuva todennäköisyyslaskenta toimii vain mittaustasolla. Täten voidaan tulla perustellusti johtopäätökseen, että kvanttifysiikan mittauksissa voidaan tarvita perinteisestä todennäköisyyslaskennasta poikkeavaa teoriaa. Yhtenä ongelmana tässä ristiriidassa oli se, että oletettiin ettei mittaus voi vaikuttaa toisen parin partikkelin mittaukseen. Tämä rikkoisi lokaalisuutta ja Einsteinin sääntöjä. On kuitenkin matemaattisesti "helpompaa" hyväksyä epälokaalisuus, kuin olettaa Kolmogorovin perusaksioomat vääriksi. [8]

7 CBD

Määritellään tapa määritellä epäkontekstuaalisuus epäyhtenevissä syklisissä systeemeissä. Meillä on äärellinen mitattavien objektien joukko $Q = \{q_1, \dots, q_n\}$, sekä kontekstien joukko $C = \{c_1, \dots, c_m\}$. Nyt C on koko kontekstien joukko, ja merkitään C_q :lla tämän osajoukkoa, joka sisältää kaikki q :n omaavat kontekstit. Muuttuja R_q^c mittaa objektia q kontekstissa c , ja R^c on yhteisjakautunut joukko samanaikaisesti mitattuja arvoja objekteista Q samassa kontekstissa. Eri konteksteissa mitatut arvot ovat toisistaan stokastisesti erilliset, eikä niillä ole yhteisjakaumaa. Satunnaismuuttujien joukko, joka kuvaa samaa objektia mitattuna eri konteksteissa, on liitos $\{R_q^c : c \in C_q\}$. Liitoksen alkioit ovat pareittain toisistaan riippumattomat. Koska kyseessä on epäyhtenevä systeemi, voi liitoksen sisällä muuttujilla olla keskenään erilaiset jakaumat. Nyt kontekstien ja objektien joukot yhdessä muodostavat koko systeemin $\{R^c : c \in C\}$.

Nyt voidaan määritellä kytkentä joukolle $\{R_q^c : q \in c \in C_q\}$, mikä on yhteisjakautunut satunnaismuuttujien joukko $S = \{S_q^c : q \in c \in C_q\}$, ehdolla että kaikille $c \in C$ pätee $\{S_q^c : q \in c\} \sim \{R_q^c : q \in c\}$, eli niillä on samat yhteisjakaumat. Jatkossa käytetään tarpeen tullen yksinkertaisempia merkintöjä, niin että mitattavan objektin q_i ja kontekstin c_j tapauksessa merkitään $R_{q_j}^{c_i} = R_j^i$.

7.1 Dikotomiset sykliset systeemit

Tarkennetaan nyt käsiteltävän systeemin rakennetta. Teoriaa halutaan sovellettavan nyt systeemeihin, jotka toteuttavat seuraavat kolme ehtoa. Ensin vaaditaan, että jokaisessa kontekstissa esiintyy vain ja ainoastaan kaksi mitattavaa muuttujaa. Toiseksi jokainen mitattava muuttuja esiintyy aina vain kahdessa eri kontekstissa, ja kolmanneksi kaikki muuttujat saavat vain dikotomisista arvoja $\{-1, 1\}$. Systeemi, joka toteuttaa nämä ehdot, on dikotominen syklinen systeemi.

Määritelmä 1. *Systeemien syklisyys*

Dikotomisen syklisen systeemin muuttujat Q , voidaan järjestää yhteen tai useampaan sykliseen systeemiin $q_1 \rightarrow q_2 \rightarrow \dots \rightarrow q_k \rightarrow q_1$, siten että jokainen peräkkäinen alkio pari muodostaa yhdessä kontekstin. Muuttujaa k kutsutaan syklisen systeemin asteeksi. Jatkossa oletetaan, että käsiteltävät systeemit voidaan asettaa aina yhteen sykliseen systeemiin $q_1 \rightarrow q_2 \rightarrow \dots \rightarrow q_n \rightarrow q_1$.

7.2 Epäkontekstuaalisuuden mallintaminen

CbD:n mukainen yleinen epäkontekstuaalisuus voidaan määritellä seuraavasti. Satunnaismuuttujien systeemi $\{R_q^c : q \in c \in C\}$ on epäkontekstuaalinen, jos ja vain jos sillä on olemassa kytkentä $\{S_q^c : q \in c \in C\}$, jonka jokainen liitos $S_q := \{R_q^c : q \in C_q\}$ on alkuperäisen systeemin vastaavan liitoksen $R_q := \{R_q^c : q \in C_q\}$ (pareittain) maksimaalinen kytkentä.

Jatkossa tarkastelemme kuitenkin vain syklisiä systeemejä, joille epäkontekstuaalisuusehto saadaan seuraavan lauseen mukaiseen yksinkertaiseen muotoon:

Lause 3. *teorian syklisten systeemien päälause*[3]

Astetta $n > 1$ oleva dikotominen syklinen systeemi on määritelmän mukaan epäkontekstuaalinen, jos ja vain jos

$$s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle, 1 - |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle| : i = 1, \dots, n) \leq 2n - 2,$$

missä:

$$s_1(x_1, \dots, x_n) = \max_{l_1, \dots, l_n \in \{-1, 1\}, \prod_k l_k = -1} \sum_k l_k x_k.$$

Lauseessa termi $\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle$ kuvaa kontekstin sisäistä kvanttikorrelaatiota. Samoin $1 - |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle|$ kuvaa kontekstien välisten kytkentöjen maksimaalisia mahdollisia korrelaatioita. Yhtenevissä liitoksissa $\langle R_i^i \rangle$ ja $\langle R_i^{i-1} \rangle$ ovat yhtä suuret, joten kontekstien välinen termi tulee turhaksi, ja funktio sievenee muotoon $s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n) \leq n - 2$. Kyseinen funktio esiintyy esimerkiksi Leggett–Garg-epäyhtälöissä.

Todistetaan seuraavaksi lause käyttäen apuna joukkoa aputuloksia, jotka löytyvät liitteet osiosta. Olkoon $\{(R_i^i, R_{i+1}^i) : i = 1, \dots, n\}$ konteksti, ja $\{(R_i^{i-1}, R_i^i) : i = 1, \dots, n\}$ liitos annetuilla odotusarvoilla $\{\langle R_i^i, R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n\}$ ja $\{\langle R_i^{i-1}, R_i^i \rangle : i = 1, \dots, n\}$. Lauseen 6 mukaan näille voidaan asettaa yhteisjakauma jos ja vain jos

$$s_1(\langle R_i^i, R_{i+1}^i \rangle, \langle R_i^{i-1}, R_i^i \rangle : 1, \dots, n) \leq 2n - 2$$

Koska liitoksen (R_i^{i-1}, R_i^i) muuttujat ovat dikotomisista ± 1 -muuttujia, voidaan todennäköisyys niiden yhtäsuuruudelle ilmaista muodossa

$$P(R_i^{i-1} = R_i^i) = (1 + \langle R_i^{i-1}, R_i^i \rangle) / 2$$

Tämä todennäköisyys selvästi saa maksimaalisen arvonsa silloin kuin $\langle R_i^{i-1}, R_i^i \rangle$ maksimoituu. Lemman 2 mukaan tämän suurin mahdollinen arvo on $1 - |\langle R_i^{i-1} \rangle - \langle R_i^i \rangle|$. Funktion $s_1()$ määritelmästä seuraa, että

$$\begin{aligned} s_1(\langle R_i^i, R_{i+1}^i \rangle, \langle R_i^{i-1}, R_i^i \rangle : 1, \dots, n) &\leq \\ s_1(\langle R_i^i, R_{i+1}^i \rangle, 1 - |\langle R_i^{i-1} \rangle - \langle R_i^i \rangle| : 1, \dots, n) &\leq 2n - 2. \end{aligned}$$

Lause 4. *Maksimaalisen kontekstuaalisuuden ehto yhtenevässä tapauksessa*[3]

Astetta $n > 1$ oleva yhtenevä dikotominen systeemi on epäkontekstuaalinen, jos

$$s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n) \leq n - 2.$$

Todistetaan tämä vastaavasti lähtemällä liikkelle lauseen 6 antamasta muodosta:

$$s_1(\langle R_1^1, R_2^1 \rangle, \dots, \langle R_n^n, R_1^n \rangle, 1, \dots, 1) \leq 2n - 2.$$

Tässä voidaan käyttää hyväksi funktion s_1 muotoa

$$s_1(x_1, \dots, x_k) = \sum_{i=1}^k |x_i| - 2[x_1, \dots, x_k > 0] \min(|x_1|, \dots, |x_k|),$$

jossa $[P] = \begin{cases} 1, \text{ jos } P \text{ on totta} \\ 0, \text{ muulloin.} \end{cases}$

Tästä seuraa, että

$$s_1(\langle R_1^1, R_2^1 \rangle, \dots, \langle R_n^n, R_1^n \rangle, 1, \dots, 1) = \\ \sum(\langle R_1^1, R_2^1 \rangle, \dots, \langle R_n^n, R_1^n \rangle, 1, \dots, 1) - 2[(\langle R_1^1, R_2^1 \rangle, \dots, \langle R_n^n, R_1^n \rangle, 1, \dots, 1) > 0] \\ * \min(|\langle R_1^1, R_2^1 \rangle|, \dots, |\langle R_n^n, R_1^n \rangle|, 1, \dots, 1) = s_1(\langle R_1^1, R_2^1 \rangle, \dots, \langle R_n^n, R_1^n \rangle) + n, \\ \text{joten}$$

$$s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n) \leq n - 2.$$

Lause 5. *Maksimaalisen kontekstuaalisuuden ehto toisessa muodossa*[3]

Edellä määritetty Cbd-teorian päälause voidaan ilmaista myös muodossa:

$$s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n) - \sum_{i=1}^n |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle| \leq n - 2,$$

Tämä voidaan johtaa alkuperäisestä lauseesta seuraavasti:

$$2n - 2 \geq s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle, 1 - |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle| : i = 1, \dots, n),$$

josta saadaan Lemman 1 mukaan, että

$$2n - 2 \geq s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n) + s_0(1 - |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle| : i = 1, \dots, n),$$

mistä

$$s_0(1 - |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle| : i = 1, \dots, n) \geq \sum_{i=1}^n (1 - |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle|) \\ = n - \sum_{i=1}^n |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle|,$$

mistä lause seuraa.

8 Sovellus

Seuraavaksi on tarkoituksena soveltaa CbD-teoriaa dataan R-ohjelmistolla. Tarkoituksena on pystyä havaitsemaan systeemin epäkontekstuaalisuus matemaattisesti havaintoaineistosta. Tämä onnistuu menetelmällä, jossa tarkastetaan, rikkooko aineisto päälauseen epäyhtälön antaman rajan (Lause 5). Tämä voidaan tehdä esimerkiksi laskemalla päälauseen kaavan mukaisen arvon luottamusväli t-arvoja käyttäen, tai käytetään bootstrap-menetelmää luottamusvälin saamiseen. Pääasiallinen keino kuitenkin on laskea Bonferroni-korjattu $100(1 - \alpha)\%$ -luottamusväli aineistosta, ja verrata tämän alarajaa pääyhtälön raja-arvoon $n - 2$. Koska mielenkiinnon kohteena on itse menetelmä, eikä esimerkiksi kvanttifysiikka, ei ole järkevää tarkastella joukkoa käytännön aineistoja. Tehokkaampi tarkastelu metodi on käyttää simulointia sopivien aineistojen luontiin, jotta saadaan erikokoisia aineistoja eri hajonnoilla, ja voidaan mennä mielivaltaisen lähelle haluttua raja-arvoa. Tällöin voidaan tarkastella metodin kyvykkyyttä, koska luottamusvälit tuovat tietysti virhettä, ja kontekstuaalisuus voi jäädä havaitsematta, jos hajontaa on liian paljon liian lähellä raja-arvoa. Voidaan myös valita aineiston koko laskuteholle sopivaksi.

8.1 Aineiston generointi

Generoidaan aineistoja käyttäen R-ohjelmistoa (koodi tutkielman lopussa). Luodaan havaintoaineisto matriisina, jossa aina parittaiset sarakkeet kuvaavat saman kontekstin mittauksia, ja ovat vahvasti negatiivisesti korreloituneita keskenään. Nyt *Generaattori*(*cyc*, *n*, *qcor*)-funktio luo meille *n* riviä pitkän matriisin, jossa on *cyc* kappaletta sarakepareja, jotka vastaavat tietyn kontekstin havaintoja, ja jossa todennäköisyydellä *qcor* parit saavat keskenään yhtäsuuret arvot. Esimerkiksi komennolla *Generaattori*(5, 10, 0.9) saadaan aikaan taulukon yksi matriisi.

| | [,1] | [,2] | [,3] | [,4] | [,5] | [,6] | [,7] | [,8] | [,9] | [,10] |
|--------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|
| [1,] | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| [2,] | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 |
| [3,] | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 |
| [4,] | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 |
| [5,] | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 |
| [6,] | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| [7,] | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| [8,] | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 |
| [9,] | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | -1 |
| [10,] | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 |

Taulukko 1: Generaattori(5,10,0.9) havaintomatriisi-A, pystyviivoilla toisistaan erotetut osat ovat stokastisesti erillisiä

Koska tarkoituksena on generoida mielenkiintoisia matriiseja, jotka voidaan ehkä todeta epäkontekstuaalisiksi, voidaan tällä tavalla generoida ainoastaan dikotomisia syklisiä ryhmiä, joissa on pariton määrä syklejä. Syynä tähän on päälauseen termi:

$$s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n) = \max_{l_1, \dots, l_n \in \{-1, 1\}, \prod_k l_k = -1} \sum_k l_k \langle R_k^k R_{k+1}^k \rangle.$$

Maksimointioperaattori pakottaa summalle parittoman määrän negatiivisia ker-toimia. Täten tapauksessa, jossa on pariton määrä vahvasti negatiivisesti korreloi-tuneita pareja, saadaan kaikki negatiiviset kvanttikorrelaatiot käännettyä positiivisiksi. Tällöin on helppo löytää tapaus jossa epäyhtälön $(n - 2)$ -rajaa rikotaan. Vastaavasti tapauksessa jossa korrelaatiot ovat positiivisia, maksimointi operaattori pakottaa ainakin yhden negatiiviseksi, milloin summan on hankala rikkoa epäyhtä-lön rajaa. Voidaan toki generoida erilaisia epäyhtälöä rikkovia aineistoja, sekä pa-rillisella määrällä pareja, että yhdistelmällä positiivisia ja negatiivisia kvanttikorre-laatiota. Funktiolla *Generaattori2*(A, r) voidaan matriisilta A vaihtaa r -kappaletta muuttujia eri merkkisiksi eri konteksteissa. Näin esimerkiksi alkuperäinen A -matriisi voidaan muokata komennolla *Generaattori2*($A, 2$) seuraavasti:

| | [,1] | [,2] | [,3] | [,4] | [,5] | [,6] | [,7] | [,8] | [,9] | [,10] |
|--------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|-------|
| [1,] | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 |
| [2,] | -1 | 1 | 1 | 1 | -1 | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 |
| [3,] | 1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | 1 |
| [4,] | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 |
| [5,] | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| [6,] | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 |
| [7,] | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 |
| [8,] | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 | 1 | 1 |
| [9,] | 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | 1 | 1 |
| [10,] | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | -1 |

Taulukko 2: Generaattori($A, 2$) muunnettu havaintomatriisi

Näin pystytään simuloimaan monipuolisesti erilaisia ja kokoisia matriiseja kontekstuaalisuuden testaamista varten. Valitsemalla sopivat kvanttikorrelaatiot, on mahdollista hallita kuinka lähellä $(n - 2)$ -raja-arvoa liikutaan, sekä voidaan tarkastella kuinka paljon poikkeamaa yhtenevästä liitoksesta metodi sietää.

8.2 Kontekstuaalisuuden testaus

Generoitujen aineistojen kontekstuaalisuutta voidaan testata tutkimalla noudattako, vai rikkooko se päälauseen raja-arvoa:

$$s_1(\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle : i = 1, \dots, n) - \sum_{i=1}^n |\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle| \leq n - 2.$$

Käytetään testaukseen päälauseen jälkimmäistä muotoa. Testaus voidaan toteuttaa laskemalla ensin $100(1 - \alpha)\%$ luottamusväli halutulla alfasolla epäyhtälön vasemmalle puolella. Tämä saadaan aikaiseksi laskemalla Bonferroni-korjatut $100(1 - \alpha/n)\%$ luottamusvälit, sekä $\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle$ että $\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle$ -termeille. On huomioitava, että vaikka luottamusvälit saadaan helpolla laskettua, funktio $s_1()$ sisältää maksimointioperaattorin. Tämän takia haluttu minimiarvo ei aina löydy muuttujien luottamusvälien reunoilta, ja erikoistapauksissa maksimointioperaattorin käyttämä ”strategia” voi vaihdella luottamusvälin sisällä. Tämän takia R-ohjelmistolla pitää aina ratkaista maksimointiongelma siihen pystyvällä ohjelmalla, tai käyttää eksaktia ratkaisua, mikä itsessään ei ole liian monimutkainen.

Kontekstuaalisuuden testaus onnistuu nyt $raja(A, alfa)$ -funktioilla, missä A -matriisista lasketaan päälauseen epäyhtälön vasemman puolen $alfa$ -tason luottamusvälin alaraja. Halutaan, että koko luottamusväli on raja-arvoa suurempi, joten alaraja on nyt kiinnostuksen kohteena. Tutkitaan esimerkiksi generoitua havaintoaineistoa b , joka on luotu komennolla $Generaattori(7, 10000, .91)$. Pariton syklien määrä, suuri havaintojen määrä, sekä $qcor$ -arvo lähellä yhtä, tarkoittaa että generoitu aineisto luultavasti rikkoo epäyhtälöä sopivalla alfasolla. Jotta voidaan laskea luottamusväli epäyhtälön vasemmalle puolelle, tarvitaan muutama välivaihe. Ensiksi tarvitaan luottamusvälit sekä $\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle$, että $\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle$ termeille. Ensin voidaan laskea matriisista kvanttikorrelaatiot komennolla $QC()$. Funktio laskee kahden vektorin kvanttikorrelaation, sekä keskihajonnan. Esimerkiksi $QC(b[1, 1], b[1, 2])$ antaa arvot:

$$[1] \quad - 0.815600000 \quad 0.003878101.$$

Tätä hyödyntäen voidaan laskea kaikki matriisin kvanttikorrelaatioiden luottamusvälit komennolla $luottamusv(b, 0.00001)$, josta saadaan tuloste:

$$\begin{aligned} [1] & \quad - 0.8381857 \quad - 0.7930143 \quad - 0.8442772 \quad - 0.7997228 \quad - 0.8317023 \\ [6] & \quad - 0.7858977 \quad - 0.8429455 \quad - 0.7982545 \quad - 0.8397095 \quad - 0.7946905 \\ [11] & \quad - 0.8431358 \quad - 0.7984642 \quad - 0.8355174 \quad - 0.7900826, \end{aligned}$$

jossa on kunkin kontekstin sisäisen kvanttikorrelaation luottamusvälin ala- ja yläraja. Ensimmäinen ja toinen arvo antavat ala- ja ylärajan ensimmäiselle kontekstille,

ja pareittain niin edelleen. Rajoja laskittaessa käytetään normaaliaprosimaatiota, joka aiheuttaa harhaa, mutta tämä ei ole merkityksellistä tulosten kannalta. Vastavat arvot tarvitaan myös $\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle$ termeille. Nyt $QC()$ funktio korvataan $QC2()$ funktiolla, sekä varsinaiset luottamusvälit saadaan laskettua $linkit()$ -funktioilla. Tässä tapauksessa $linkit(b, 0.0001)$ antaa luottamusvälit:

$$[1] \quad 0.007461821 \quad 0.021338179 \quad 0.008382912 \quad 0.022817088 \quad 0.004925530$$

$$[6] \quad 0.017074470 \quad 0.001628494 \quad 0.010771506 \quad 0.009942016 \quad 0.025257984$$

$$[11] \quad 0.004635792 \quad 0.016564208 \quad 0.010573094 \quad 0.026226906.$$

Seuraavaksi halutaan laskea päälauseen epäyhtälön vasemman puolen luottamusvälin alaraja. Käytännössä tämä saadaan etsimällä $\langle R_i^i R_{i+1}^i \rangle$ termien luottamusvälien sisältä saatava pienin s_1 arvo ja vähentämällä tästä luottamusvälien sallimat mahdollisen suuret $\langle R_i^i \rangle - \langle R_i^{i-1} \rangle$ arvot. Esimerkki matriisista tämä saadaan komenolla $raja(b, 0.0001)$:

$$[1] \quad 5.535748 \quad 5.000000,$$

eli alfasolalla 0.0001 luottamusväli on kokonaisuudessaan suurempi kuin raja $n-2 = 5$, mikä tarkoittaa että systeemi on kontekstuaalinen. Koska kyseessä on tilastollinen testaus, ei epäkontekstuaalisuutta voida tällä todistaa, vaan aina jää alfasolasta riippuen epävarmuutta. Tämän takia halutaan alfasol mahdollisimman tiukaksi, koska se että aineisto rikkoo klassisen fysiikan lokaalisuutta 95% todennäköisyydellä, on melkein hyödytön. Kun luottamusvälit lasketaan vaikka 10^{-10} mittakaavalla, voidaan saatua tulosta pitää riittävän uskottavana. Funktio palauttaa halutun alarajan lisäksi epäyhtälön oikean puolen verrattavan arvon.

8.3 Luottamusvälit ja maksimointi

Kuten aikaisemmin todettiin, funktion s_1 minimi ei ole aina luottamusvälin ääripäissä. Näissä erikoistapauksissa tulee vastaan pieni ongelma, missä luottamusvälien käyttö ei täysin toimi halutulla tavalla. Otetaan esimerkiksi yksinkertainen tapaus jossa $n = 3$. Funktio s_1 oli siis muotoa:

$$s_1(x_1, \dots, x_n) = \max_{l_1, \dots, l_n \in \{-1, 1\}, \prod_k l_k = -1} \sum_k l_k x_k.$$

Jos funktiolle annetaan arvot (A, B, C) , saadaan funktiosta summa $\pm A \pm B \pm C$, jossa summan etumerkit valitaan maksimoimaan summaa funktion ehdon mukaisesti. Maksimointifunktion ehtona on, että annettujen etumerkkien tulo on negatiivinen, eli negatiivisia kertoimia on oltava pariton määrä. Eli jos käytetään esimerkkinä arvoja $(-1, -1, -1)$, maksimointifunktio voi kääntää kaikki kolme arvoa positiiviseksi, jolloin saadaan $s_1(-1, -1, -1) = 3$. Toisin taas tapauksessa $(-1, -1, 0.2)$ ei voida käyttää kahta, eli parillista määrää, negatiivista kerrointa. Nyt saadaan $s_1(-1, -1, 0.2) = 1 + 1 - 0.2 = 1.8$. Vastaavasti saadaan $s_1(-1, -0.5, 0.5) = 1 + 0.5 - 0.5 = 1$. Nyt pisteiden $(-1, -0.5, 0.5)$ sijaan avataan arvot B ja C väleiksi $(-1, \{-0.4, -0.6\}, \{0.4, 0.6\})$. Nyt arvoista B ja C toinen on aina negatiivinen,

sen mukaan kumpi vaihtoehto antaa suuremman summan. Jos siis arvot ovat itseisarvoltaan eri suuruiset, maksimointifunktio valitsee suuremman itseisarvon positiiviseksi. Täten meillä näillä väleillä on kaksi maksimipistettä $s_1(-1, -0.4, 0.6) = s_1(-1, -0.6, 0.4) = 1.2$. Minimipisteitä tosin löytyy tässä tapauksessa ääretön määrä, sillä $s_1(-1, -a, a) = 1$ kun $a \in [0.4, 0.6]$. Mitä jos nyt kavennettaisiin arvojen B ja C annettuja välejä. Kuvitellaan annetut välit teoreettisiksi arvojoukoiksi ja otetaan näistä jonkinlaiset luottamusvälit. Jos välejä kavennetaan, maksimikohdat jäävät välien ulkopuolelle ja funktion maksimitulos pienenee. Tosin taas funktion minimi ei muutu. Piste $(-1, -0.5, 0.5)$ on välien keskipiste, ja myös funktion minimikohta. Luottamusvälin tiukkuus voidaan valita mielivaltaisesti ja silti tämä ei vaikuta funktion minimiin.

Edellinen esimerkki osoittaa, että kun päälauseen muuttujista otetaan luottamusvälit, ei funktio tuota vastaavaa luottamusväliä. Siis jos katsotaan jotain arvojoukkoa ja päälauseen tälle tuottamaa funktion kuvaa, pienimpien ja suurimpien arvojen poistaminen ei välttämättä poista vastaavasti funktiosta saatavien arvojen pienimpiä ja suurimpia arvoja. Kun funktion sisäinen maksimointi-operaattori ei vaihda strategiaa annetun välin sisällä, on kyseessä hyvin käyttäytyvä lineaarinen funktio, joka on kasvava ja sen ääriarvot ovat välin päissä. Täten ottamalla luottamusväli funktion alkuarvoista antaa vastaavan luottamusvälin kuvajoukosta. Kun maksimointi aiheuttaa strategian vaihdon välin sisällä, muodostuu lineaariseen funktioon kulma, joka ei ole derivoituva. Tämä luo uuden mahdollisen ääripisteen, mikä tässä tapauksessa on aina minimi. Päälauseessa juuri välin minimi on mielenkiinnon kohteena, mikä tekee tästä ongelmallista. Tosin ensinnäkin tämä ongelma tulee vastaan vain tietyissä tapauksissa. Toiseksi luottamusvälin ääripäiden toimiminen ei-halutulla tavalla tapahtuu vain maksimissaan kahden muuttujan kohdalla kerrallaan. Jos meillä on tapaus $n = 10$, muuttujista kahdeksan toimii luottamusvälin kuvan suhteen lähes oikein, joten luottamusväli toimii melkein halutulla tavalla. Heittoa on enemmän pienillä n -arvoilla. Huomattavaa on, että tapauksessa $n = 10$ on yhteensä 20 eri muuttujaa, mutta yleensä näistä varsinaiset kvanttikorrelaatiot ovat suuruusluokaltaan suurempia kuin jälkimmäiset termit. Siis funktion s_1 sisällä on nyt kymmenen muuttujaa ja sen ulkopuolella 10 lisää, ja meitä kiinnostava epäkohta on nyt täysin maksimointi funktion s_1 sisällä. Viimeisenä voidaan todeta, että päälause tarkastelee meneekö kyseinen summa yli annetun raja-arvon. Tilanteessa jossa luottamusvälit eivät anna funktion kautta luottamusväliä funktion kuvasta, saatu tulos on vain hieman turhan tiukka. Päälauseella pyritään osoittamaan epäkontekstuaalisuutta. Jos löydetään aineisto, jossa havaitaan epäkontekstuaalisuutta, ei tämä epäkohta ole ongelma. On mahdollista että jossain tapauksissa päälauseen arvo on hyvin lähellä raja-arvoa, ja luottamusväli saa virheellisesti liian pienen alarajan, minkä takia epäkontekstuaalisuutta ei havaita. Tällaisessa tapauksessa epäkontekstuaalisuus voitaisiin havaita bootsrapin tapaisella menetelmällä, jossa luottamusväli otetaan vasta funktion kuvajoukosta, eikä voida saada vääristynyttä luottamusväliä funktion käyttäytymisen takia. On myös huomioitava, että jos epäkontekstuaalisuus jää havaitsematta tällä metodilla, on luultavasti syynä Bonferroni-korjaus, joka kasvattaa luottamusväliä huomattavasti. Tähän verrattuna edellä mainittu mahdollinen ongelma luottamusvälien kuvan kanssa on verrattavan pieni.

Kun edellä mainitulla tavalla otetaan huomioon funktion käyttäytyminen luot-

tamuvälien sisällä, saadaan aikaan hyödyllinen testi. Kuitenkin luottamuvälien käyttö on ongelmallista ja metodin käyttö vaatii jonkunlaisen perustelun, kuten sellaisen joka edellä esitettiin. Ongelmana on se että kohdefunktio ei ole derivoituva. Jotta alkuarvojen persentiilit kuvautuisivat vastaaviksi persintiileiksi kuvajoukolle, tulisi funktion olla jatkuva ja kääntyvä. Tämä ei toteudu funktion s_1 kanssa. Voimakas korrelaatio pienellä varianssilla antaa luottamuvälin, jonka sisällä funktio käyttäytyy halutulla tavalla. Kuitenkin jos katsotaan koko korrelaation arvojoukkoa $[-1, 1]$, niin luottamuvälin ulkopuolelta löytyy todennäköisyysmassaa koko arvojoukon alueelta. Osa todennäköisyysmassasta sijaitsee aina ei-derivoituvan pisteen toiselta puolen, jolloin saatu kuvajoukon luottamuväli ei ole täsmällinen. Tämä virhe on kuitenkin häviävän pieni epäkontekstuaalisissa tapauksissa, ja taas virhe aiheuttaa testin olevan haluttua tiukempi, joten haluttu alfa-taso säilyy testauksessa.

8.4 Bootstrap

Suoritetaan vastaava epäkontekstuaalisuustestaus käyttäen bootstrap-menetelmää. Bootstrap-menetelmä on tapa arvioida tunnusluvun, kuten keskiarvon, otantajakaumaa, jonka kautta voidaan estimoida haluttu luottamuväli. Tässä tapauksessa aikaisemmin pyrittiin luomaan luottamuväli epäkontekstuaalisuuden testisuurelle laskemalla päälauseen funktion alkuarvoille luottamuvälit ja selvittämällä funktion saamat arvot. Nyt alkuperäisestä matriisista otetaan bootstrap-otannalla lukuisia otoksia, joista lasketaan päälauseen funktion sama arvo. Näin päälauseen testisuurelle saadaan simuloitua pseudo-jakauma, josta voidaan suoraan katsoa testisuureen otantajakauman persentiiliväli, jota voidaan käyttää luottamuvälin estimaattina. Missä luottamuvälien kanssa käytettiin *raja*-funktioita laskemaan päälauseen sama luottamuvälin ala-arvo, nyt lasketaan simuloituista matriiseista tarkka päälauseen arvo käyttäen *raja2*-funktioita. Matriisille A tehdään nyt bootstrap-otanta *bootstrap1*(A, R)-funktioilla, joka ottaa R -kappaletta otantoja matriisista ja palauttaa näiden saamat päälauseen arvot. Näiden arvojen luottamuvälin alaraja saadaan *bootstrap2*($A, alfa, R$)-funktioilla, joka antaa alarajan halutun *alfa*-tason mukaisesti.

Generoidaan joitakin matriiseja bootstrap-menetelmän testausta varten, ja testataan löytääkö funktio aineistosta epäkontekstuaalisuuden. Matriisien koko ja otantojen määrä täytyy rajata laskentatehon mukaan, toisinkin aikaisempi menetelmä salli suuremmat matriisit pienemmällä laskuteholla. Tämä voidaan tietenkään pitää bootstrapin heikkoutena, mutta nykyään laskuteho ei ole rajoittava ongelma. Käytetään samaa matriisia kuin aikaisemmin, eli *Generaattori*(7, 10000, .91)-komennolla saatavaa epäkontekstuaalista b -matriisia. Nyt haluttu tulos saadaan komennolla *bootstrap2*($b, 0.01, 1000$):

[1] 5.611597 5.0000.

Funktio löytää matriisista epäkontekstuaalisuuden halutusti, ja voidaan huomata että luottamuvälin alaraja on suurempi kuin aikaisempaa metodologia käytettäessä. Tämä tulee olemaan jatkuva trendi funktioita testattaessa. Bootstrapin kanssa on huomioon otettavaa, että funktioon kuuluu satunnaisotanta. Tämän takia saatava tulos vaihtelee satunnaisesti. Jos esimerkiksi äskeinen tapaus ajetaan viisi kertaa,

saadaan tulokset:

5.618387 5.614988 5.6212 5.617592 5.614196.

Tähän satunnaisuuteen vaikuttaa otantojen määrä, ja tarkkuutta voidaan parantaa kunhan laskuteho riittää. Meillä on nyt kaksi tapaa testata epäkontekstuaalisuutta. Vertaillaan *raja*-funktiota ja *bootstrap2*-funktiota toisiinsa generoimalla matriisi komennolla *Generaattori*(5,1000,.09) kymmenen kertaa, ja jokaiselle matriisille suoritetaan epäkontekstuaalisuus testaus alfa-arvolla 0.01 ja 10000:lla bootstrap otannalla. Nyt saadaan tulokset

[1] 3.430559 3.63799 [2] 3.515967 3.74199 [3] 3.32659 3.63
 [4] 3.445696 3.67799 [5] 3.439061 3.674 [6] 3.416924 3.602
 [7] 3.281613 3.59 [8] 3.448642 3.65 [9] 3.596304 3.784
 [10] 3.397005 3.69999,

jossa aina ensimmäinen arvo on *raja*-funktion antama arvo ja toinen on bootstrap ajon tulos. Havaitaan, että bootstrap antaa suurempia arvoja, mikä johtuu toisen metodin käyttämästä Bonferroni-korjauksesta. Bootstrap on nähtävästi siis parempi havaitsemaan epäkontekstuaalisuutta kyseisessä tapauksessa. Suurin ero näiden välillä on vaadittava laskuteho, koska rajallisella prosessoriteholla nähdään jo selvä ero käytetyssä ajassa. Luottamusvälien käyttö toimii lähes välittömästi, kun taas 10000 otantaa vaatii jo hetken aikaa. Tämä rajoittaa alfatason tiukkuutta bootstrapin laskutehon kannalta, mutta toisaalta paremmalla teholla suuremman otannan käyttö voisi parantaa bootstrapin antamia tuloksia. Esimerkkinä vielä erilaisten generoitujen matriisien saamat arvot ($\alpha = 0.01$, $otanta = 10000$):

$A : \text{Generaattori}(3, 2000, 0.78) : 1.502297 \quad 1.586 \quad < 1$
 $B : \text{Generaattori}(9, 1000, 0.91) : 6.424016 \quad 6.90199 \quad < 7$
 $C : \text{Generaattori}(4, 2000, 0.88) : 1.244599 \quad 1.331 \quad < 2$
 $D : \text{Generaattori}2(C, 1) : 2.679248 \quad 2.802 \quad < 2$
 $E : \text{Generaattori}(8, 1000, 0.93) : 4.493142 \quad 4.794 \quad < 6$
 $F : \text{Generaattori}2(E, 1) : 6.106743 \quad 6.446 \quad < 6.$

Nähdään selvästi, miten bootstrap antaa tiukemman luottamusvälin, mikä tässä siis näkyy korkeampana luottamusvälin alarajana. Esimerkeistä voi havaita myös sen, miten suurimmilla n :nän arvoilla epäkontekstuaalisuutta on vaikeampi havaita. Vaaditaan voimakkaampia kvanttikorrelaatioita, jotta niiden summa saadaan raja-arvon yli. Tämä johtuu siitä, että rajassa $n - 2$ isoilla arvoilla n tulee termi -2 vähemmän merkittäväksi.

9 Yhteenveto

Voidaan todeta, että haluttu epäkontekstuaalisuustestaus onnistuu kummallakin esitettyllä R-ohjelmiston funktiolla. Verrattaessa näitä keskenään, havaitaan molemmilla olevan vahvuuksia ja heikkouksia. Nämä menevät sopivasti ristiin, joten eri tilanteissa vaihtelee kumpaa metodia on parempi käyttää. Ei voida tuomita toista menetelmää toista huonommaksi, vaan molemmat ovat erittäin hyödyllisiä. Bonferroni-korjattuihin luottamusväleihin perustuva metodi on laskutehon kannalta huomattavasti yksinkertaisempi laskutoimitus, ja se ei tarvitse edes suurissa aineistoissa kaikkea tietoa, vaan metodi toimii jopa pelkillä riittäväillä tunnusluvuilla. Bootstrap vaatii lukuisia otantoja, joko koko aineistosta tai sarakeparista, mikä on ongelmallista isoissa aineistoissa. Päinvastoin pienissä aineistoissa bootstrap toimii oikein hyvin, kun taas Bonferroni-korjaus tuottaa ongelmia suurilla hajonnoilla ja pienissä aineistoissa. Bootstrap-menetelmä havaitsee epäkontekstuaalisuuden tehokkaammin hankalemmissa aineistoissa. Toisaalta kvanttikorrelaatioiden luottamusväleihin perustuvaa metodia voidaan pitää tiukempuna mittana, ja täten vahvana perusteena epäkontekstuaalisuudelle. Tämä siis jos verrataan, että menetöt vain toteavat aineistot epäkontekstuaalisiksi. Bootstrap-menetelmä voi antaa funktiolle todella suuren arvon, joka on selvästi epäyhtälön rajan yläpuolella, ja täten antaa myös vahvan perustelun epäkontekstuaalisuudelle. Bootstrap ei tosin toimi todella pienillä alfa-tasoilla.

Esitetyt funktiot ovat toki hyvin yksinkertaisia, ja niihin on helppo löytää mahdollisia kehityskohteita. Bonferronia käyttävän metodin ongelma on juuri Bonferroni-korjaus. Tämä on erittäin brutaali ratkaisu monivertailuongelmaan, ja olisi hyvä jos tähän löytyisi kevyempi ratkaisu tai jos perustellusti voitaisiin monivertailu ongelma kiertää jotenkin kokonaan. Myös luottamusvälien ajaminen funktion läpi ei toimi täydellisesti halutulla tavalla, ja tähän olisi mielenkiintoista löytää elegantti ratkaisu, vaikka sitä ei suoranaisesti tarvita. Bootstrappia taas olisi helpoin tapa parantaa, koodaamalla funktio tehokkaammaksi laskutehon kannalta. Parempi koodaaja voisi tehostaa funktiota laskennallisesti tai vaikka muistin käytön kannalta. Tämän työn pääpainona ei ollut ohjelmointi, mutta jos tätä luotua koodia haluaisi todella käyttää isoihin aineistoihin, olisi tehokkaamman bootstrap-otannan käyttö suotavaa.

Kaiken kaikkiaan vaikka esitetty teoria on suhteellisen monimutkaista, onnistuu tarkastelu R-ohjelmistolla melko hyvin. On onnistuttu määrittelemään epäkontekstuaalisuus, ja pystytään osoittamaan se havaintoaineistosta R-ohjelmistolla.

Lähteet

- [1] Ehtibar N. Dzhafarov, Víctor H. Cervantes, and Janne V. Kujala: *Contextuality in Canonical Systems of Random Variables*. Phil. Trans. Roy.Soc. A 375 (2017).
- [2] Janne V. Kujala and Ehtibar N. Dzhafarov: *Measures of Contextuality and Noncontextuality*. Phil. Trans. Roy.Soc. A (2019).
- [3] Janne V. Kujala, Ehtibar N. Dzhafarov and Jan-Åke Larsson: *Necessary and Sufficient Conditions for Extended Noncontextuality in a Broad Class of Quantum Mechanical Systems*. Physical Review Letters 115 (2015).
- [4] Ehtibar N. Dzhafarov: *On Joint Distributions, Counterfactual Values, and Hidden Variables in Understanding Contextuality*. Phil. Trans. Roy.Soc. A (2019)
- [5] John S. Bell: *On the Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics*. Reviews of Modern Physics, volume38 (1966).
- [6] John S. Bell: *On the Einstein Podolsky Rosen Paradox*. Physics vol 1, 195-200 (1964).
- [7] Ehtibar N. Dzhafarov: *Stochastic Unrelatedness, Couplings, and Contextuality*. arXiv:1506.08218 (2015).
- [8] Hermann Thorisson: *Coupling, Stationarity and Regeneration*. Springer (2000).
- [9] Andrey.N.Kolmogorov: *Foundations of the Theory of Probability*. Chelsea publishing company (1956).
- [10] Radek Lapkiewicz, Peizhe Li, Christoph Schaeff, Nathan K. Langford, Sven Ramelow, Marcin Wieśniak, Anton Zeilinger: *Experimental non-classicality of an indivisible quantum system*. Nature 474, 490-93 (2011).
- [11] Simon Kochen, E.P. Specker: *The Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics*. Reviews of Modern Physics 38, 447-453 (1966).
- [12] Ehtibar N. Dzhafarov, Janne V. Kujala: *Context-Content Systems of Random Variables: The Contextuality-by-Default Theory*. J. Math. Psychol. 56, 54-63 (2016).
- [13] Ehtibar N. Dzhafarov, Janne V. Kujala, Jan-Åke Larsson: *Contextuality-by-Default: A Brief Overview of Ideas, Concepts and Terminology*. Lecture Notes in Computer Science 9535, 12-23 (2016).
- [14] Asher Peres: *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer Academic Publishers (2002).
- [15] Werner Heisenberg: *The Physical Principles of the Quantum Theory*. S. Hirzel Verlag (1930).

A Liitteet

Lemma 1. [3]

Kaikille $a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_m \in \mathbb{R}$:

$$s_1(a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_m) = \max \begin{cases} s_0(a_1, \dots, a_n) + s_1(b_1, \dots, b_m) \\ s_1(a_1, \dots, a_n) + s_0(b_1, \dots, b_m) \end{cases}$$

ja

$$s_0(a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_m) = \max \begin{cases} s_0(a_1, \dots, a_n) + s_0(b_1, \dots, b_m) \\ s_1(a_1, \dots, a_n) + s_1(b_1, \dots, b_m) \end{cases},$$

missä

$$s_1(x_1, \dots, x_n) = \max_{l_1, \dots, l_n \in \{-1, 1\}, \prod_k l_k = -1} \sum_k l_k x_k$$

ja

$$s_0(x_1, \dots, x_n) = \max_{l_1, \dots, l_n \in \{-1, 1\}, \prod_k l_k = 1} \sum_k l_k x_k.$$

Lemma 2. [3]

Yhteisjakaumalliset dikotomiset ± 1 arvoiset satunnaismuuttujat A ja B , odotusarvoilla $\langle A \rangle$, $\langle B \rangle$ ja $\langle AB \rangle$, ovat olemassa jos ja vain jos

$$-1 \leq \langle A \rangle \leq 1,$$

$$-1 \leq \langle B \rangle \leq 1,$$

$$|\langle A \rangle + \langle B \rangle| - 1 \leq \langle AB \rangle \leq 1 - |\langle A \rangle - \langle B \rangle|.$$

Lemma 3. [3]

Yhteisjakaumalliset dikotomiset ± 1 arvoiset satunnaismuuttujat A , B ja C , odotusarvoilla $\langle A \rangle$, $\langle B \rangle$, $\langle C \rangle$, $\langle AB \rangle$, $\langle AC \rangle$ ja $\langle BC \rangle$, ovat olemassa jos ja vain jos ne noudattavat pareittain lemmaa 2, ja

$$s_1(\langle AB \rangle, \langle AC \rangle, \langle BC \rangle) \leq 1.$$

Lemma 4. [3]

Yhteisjakautuneet mielivaltaiset satunnaismuuttujat A , B ja C , tunnetuilla marginaalijakaumilla (A, B) ja (B, C) , ovat olemassa jos ja vain jos marginaalijakaumat sopivat samaan B jakaumaan.

Seuraus 1. [3]

Yhteisjakautuneet ± 1 arvoiset satunnaismuuttujat A_1, \dots, A_n ($n \geq 3$), annetuilla odotusarvoilla $\langle A_1 \rangle, \dots, \langle A_n \rangle, \langle A_1 A_2 \rangle, \dots, \langle A_{n-1} A_n \rangle$, ovat olemassa jos ja vain jos kaikki parit (A_i, A_{i+1}) , $i = 1, \dots, n - 1$ noudattavat lemmaa 2.

Lause 6. [3]

Yhteisjakautuneet ± 1 arvoiset satunnaismuuttujat $A_1, \dots, A_n (n \geq 3)$, annetuilla odotusarvoilla $\langle A_1 A_2 \rangle, \dots, \langle A_{n-1} A_n \rangle, \langle A_n A_1 \rangle$, ovat olemassa jos ja vain jos kaikki parit $(A_1, A_2), \dots, (A_{n-1}, A_n), (A_n, A_1)$ noudattavat lemmaa 2 ja

$$s_1(\langle A_1 A_2 \rangle, \dots, \langle A_{n-1} A_n \rangle, \langle A_n A_1 \rangle) \leq n - 2$$

Lause 7.

Oletetaan, että luottamusvälit $[a_i, b_i]$ on järjestetty laskevaan järjestykseen sen mukaan, mikä on kunkin välin etäisyys nolasta. Etäisyys on tässä nolla, jos $a_i < 0 < b_i$ ja muussa tapauksessa $\min(|a_i|, |b_i|)$. Päälauseen funktio s_1 saa pienimmän arvonsa luottamusvälin sisällä seuraavasti:

a) Jokaisen luottamusvälin etäisyys nolasta on positiivinen.

Jos luottamusväleistä on pariton määrä negatiivisia, funktion pienin mahdollinen arvo on $s_1(\min(|a_1|, |b_1|), \min(|a_2|, |b_2|), \dots)$, sillä summan kaikki termit ovat positiivisia. Jos negatiivisia termejä on parillinen määrä, saadaan pienin arvo

$$s_1(-\min(\max(|a_1|, |b_1|), \min(|a_2|, |b_2|)), \min(|a_2|, |b_2|), \dots).$$

b) Luottamusväleistä n -kappaleen etäisyys nolasta on nolla ($n \geq 2$).

Funktion saama pienin mahdollinen arvo on $s_1(0, 0, \dots, (\min(|a_{n+1}|, |b_{n+1}|), \dots))$.

c) Tasan yhden luottamusvälin etäisyys nolasta on nolla.

Jos ensimmäistä luottamusväliä lukuun ottamatta muita luottamusvälejä on negatiivisia pariton määrä, funktion pienin mahdollinen arvo on

$$s_1(-\min(|a_1|, \min(|a_2|, |b_2|)), \min(|a_2|, |b_2|), \dots).$$

Muulloin funktion saama pienin arvo on $s_1(\min(|b_1|, \min(|a_2|, |b_2|)), \min(|a_2|, |b_2|), \dots)$.

Todistus. Etsitään funktion s_1 saama minimikohta annetuilla luottamusväleillä $[a_i, b_i]$. Merkitään

$$s_1(x_1, \dots, x_m) = \max_{l_1, \dots, l_m \in \{-1, 1\}, \prod_k l_k = -1} \sum_k l_k x_k = X_1 + \dots + X_m,$$

missä muuttujat x_i ovat aina itseisarvoltaan suuruusjärjestyksessä, eli $|x_1| \leq |x_2| \leq \dots \leq |x_m|$, ja $X_i = \pm x_i$. Jos muuttujista x_1, \dots, x_m pariton määrä on pienempiä tai yhtäsuuria kuin nolla, seuraa triviaalisti, että

$$X_1 + \dots + X_m = |x_1| + \dots + |x_m|.$$

Parittomassa tapauksessa maksimointi operaattori pystyy muuttamaan jokaisen etumerkin positiiviseksi. Jos summaan jää yksikin negatiivinen termi, niin

$$|x_1| + \dots - |x_i| + \dots + |x_m| = |x_1| + \dots + |x_m| - 2|x_i| \leq |x_1| + \dots + |x_m|.$$

Parillisessa tapauksessa jää ainakin yksi negatiivinen termi, jolloin

$$X_1 + \dots + X_m = -|x_1| + \dots + |x_m|.$$

Nähdään triviaalisti, että summa saa suurimman arvonsa, kun valitaan negatiiviseksi termiksi itseisarvoltaan pienen arvo. Samoin summa on silloin suurempi, kun negatiivisia termejä on vain yksi, eikä kolme tai enemmän.

Katsotaan seuraavaksi luottamusvälien tapausta $s_1([a_1, b_1], \dots, [a_m, b_m])$. Oletetaan, että välit ovat järjestetty sen mukaan, mikä on niiden etäisyys nolasta. Etsitään arvot $x_i \in [a_i, b_i]$, joilla funktio $s_1(x_1, \dots, x_m) = X_1 + \dots + X_m$ saa pienimmän arvonsa. Nyt tiedetään, että

$$X_1 \leq X_2 \leq \dots \leq X_m, \quad (1)$$

$$X_2, \dots, X_m \geq 0, \quad (2)$$

$$X_1 + X_2 \geq 0. \quad (3)$$

Nämä seuraavat edellisestä tarkastelusta.

Jaetaan luottamusväleillä olemassa olevat tapaukset kolmeen osaan. Luottamusvälin etäisyys nolasta on nolla, jos $a_i \leq 0 \leq b_i$. Merkitään tällaisten välien lukumäärää n :llä. Nyt käsitellään kolmea eri tapausta, $n = 0, n = 1$ tai $n \geq 2$.

1) $n \geq 2$.

Luottamusväleillä $[a_1, b_1], \dots, [a_m, b_m]$ funktio s_1 saa pienimmän arvonsa pisteessä:

$$m_1 = s_1(0, 0, \dots, (\min(|a_{n+1}|, |b_{n+1}|), \dots)).$$

Jos olisi olemassa tästä pienempi summa $X_1 + \dots + X_m$, niin tällä olisi oltava joko jokin pienempi positiivinen arvo, tai suurempi negatiivinen arvo. Ehdon kaksi mukaan $X_2, \dots, X_m \geq 0$, eli nämä ovat epänegatiivisiä arvoja. Pisteessä m_1 on nämä valittu itseisarvoltaan pienimmiksi mahdollisiksi luottamusvälien sisältä. Summan muuttuja X_1 voi olla negatiivinen, mutta ehdon kolme mukaan tiedetään, että $X_1 + X_2 \geq 0$. Nyt $X_1 + X_2 = 0$, joten negatiivinen termi ei voi pienentää summaa tämän enempää. Täten piste m_1 antaa funktiolle s_1 minimipisteen annetuilla väleillä.

2) $n = 0$.

Jos luottamusväleistä pariton määrä on nollaa pienempiä, saa funktio s_1 pienimmän arvonsa pisteessä

$$m_{2a} = s_1(\min(|a_1|, |b_1|), \min(|a_2|, |b_2|), \dots).$$

Todettiin, että parittomassa tapauksessa $X_1 + \dots + X_m = |x_1| + \dots + |x_m|$. Pisteessä m_{2a} summa saa luottamusvälien pienimmät mahdolliset itseisarvot, joten pisteessä m_{2a} funktio s_1 saa pienimmän arvonsa.

Parillisessa tapauksessa tiedetään, että $X_1 < 0$. Nyt funktio saa pienimmän arvonsa pisteessä

$$m_{2b} = s_1(-\min(\max(|a_1|, |b_1|), \min(|a_2|, |b_2|)), \min(|a_2|, |b_2|), \dots).$$

Taas summan positiiviset termit X_2, \dots, X_m ovat valittu itseisarvoiltaan mahdollisimman pieniksi. Jos $\max(|a_1|, |b_1|) \geq \min(|a_2|, |b_2|)$, niin silloin $\min(|a_2|, |b_2|)$ on suurin mahdollinen negatiivinen termi x_1 . Tämä johtuu rajoitteesta $X_1 \leq X_2$ ja nyt $X_1 + X_2 = 0$, mikä tarkoittaa että summan negatiivinen termi ei voi tehdä summaa pienempää. Jos $\max(|a_1|, |b_1|) \leq \min(|a_2|, |b_2|)$, niin nyt $X_1 < X_2$ ja negatiivinen termi X_1 on valittu itseisarvoiltaan mahdollisimman suureksi. Täten piste m_{2b} antaa funktiolle s_1 pienimmän mahdollisen arvon.

3) $n = 1$.

Tässä tapauksessa löytyy aina poikkeuksetta piste, jossa $X_1 < 0$. Jos luottamusväleistä $[a_2, b_2], \dots, [a_m, b_m]$ on pariton määrä negatiivisia, niin funktio s_1 saa pienimmän arvonsa pisteessä

$$m_{3a} = s_1(-\min(|a_1|, \min(|a_2|, |b_2|)), \min(|a_2|, |b_2|), \dots).$$

Samoin kuin edellä, positiiviset termit X_2, \dots, X_m ovat valittu mahdollisimman pieniksi. Negatiivinen termi on valittu samoin itseisarvoiltaan mahdollisimman suureksi rajoitteen $X_1 \leq X_2$ puitteissa.

Jos luottamusvälejä $[a_2, b_2], \dots, [a_m, b_m]$ on parillinen määrä, niin funktio s_1 saa vastaavasti pienimmän arvonsa pisteessä

$$m_{3b} = s_1(\min(|b_1|, \min(|a_2|, |b_2|)), \min(|a_2|, |b_2|), \dots).$$

□

B R-koodi

```
# Luodaan syklistä ryhmiä testausta varten. cyc= parien määrä,
# n= havaintojen määrä, qcor= todennäköisyys jolla parit saavat keskenään
# erisuuret arvot.
Generaattori <- function(cyc, n, qcor) {
  X <- matrix(nrow = n, ncol = 2 * cyc)
  for(i in 1 : cyc) {
    X[, 2 * i - 1] <- rbinom(n, 1, .5)
    v1 <- rbinom(n, 1, qcor)
    X[, 2 * i] <- (X[, 2 * i - 1] + v1) %% 2
  }
  X <- 2 * X - 1
  return(X)
}

#Muokataan generoitua matriisiä A. Vaihdetaan r eri parin korrelaatio
#positiiviseksi. Generaattori1 luo vain mielenkiintoisia matriiseja joissa cyc
# on pariton. Generaattorilla kaksi voidaan testata parillisia syklistä ryhmiä.
Generaattori2 <- function(A, r) {
  r2 <- min(r, ncol(A)/2)
  vec <- 1 : (ncol(A)/2)
  x1 <- sample(vec, r2)
  for(i in 1 : length(x1)) {
    A[, x1[i] * 2] <- A[, x1[i] * 2] * (-1)
  }
  return(A)
}

#Kahden vektorin kvanttikorrelaatio. Vaatii kaksi yhtäpitkää {1, -1} arvoista
#vektoria.<A,B> -termi. Return: (kvanttikorrelaatio, keskihajonta).
QC <- function(A, B) {
  C <- A * B
  x <- sum(C)/length(A)
  x1 <- abs(x) * (1 - abs(x))/length(A)
  ret <- c(x, sqrt(x1))
  return(ret)
}
```



```

# Lasketaan erillisellä funktiolla matriisista kvanttikorrelaatiot
# luottamusväleineen. A= {1, -1} arvoinen havainto matriisi, jossa kolumnit
# (1, 2) ovat saman kontekstin mittauksia, {2, 3} ja {1, n} näiden linkit.
#Alfa= haluttu alfaso.
luottamusv <- function(A, alfa) {
  B <- 1 - qt(alfa/ncol(A), nrow(A) - 1)
  X <- vector(length = ncol(A))
  for(i in 1 : (ncol(A)/2)) {
    X[2 * i - 1] <- QC(A[, 2 * i - 1], A[, 2 * i])[1]
    -B * QC(A[, 2 * i - 1], A[, 2 * i])[2]
    X[2 * i] <- QC(A[, 2 * i - 1], A[, 2 * i])[1]
    +B * QC(A[, 2 * i - 1], A[, 2 * i])[2]
  }
  return(X)
}

# Kahden vektorin keskiarvon ero ja näiden keskihajonta.
# <A>-<B> -termi.
QC2 <- function(A, B) {
  x <- abs(mean(A) - mean(B))
  x1 <- abs(x) * (1 - abs(x))/length(A)
  ret <- c(x, sqrt(x1))
  return(ret)
}

# Lasketaan syklistä matriisista linkkien väliset <A>-<B> -termit
# luottamusväleineen.
linkit <- function(A, alfa) {
  B <- 1 - qt(alfa/ncol(A), nrow(A) - 1)
  X <- vector(length = ncol(A))
  for(i in 1 : (ncol(A)/2 - 1)) {
    X[2 * i - 1] <- QC2(A[, 2 * i], A[, 2 * i + 1])[1]
    -B * QC2(A[, 2 * i], A[, 2 * i + 1])[2]
    X[2 * i] <- QC2(A[, 2 * i], A[, 2 * i + 1])[1]
    +B * QC2(A[, 2 * i], A[, 2 * i + 1])[2]
  }
  X[ncol(A) - 1] <- QC2(A[, 1], A[, ncol(A)])[1]
  -B * QC2(A[, 1], A[, ncol(A)])[2]
  X[ncol(A)] <- QC2(A[, 1], A[, ncol(A)])[1]
  +B * QC2(A[, 1], A[, ncol(A)])[2]
  return(X)
}

```

```

# Kontekstuaalisuus testaus matriisille halutulla alfatasolla. Etsitään
# kohdefunktion tuloksen luottamusvälin pienin arvo mitä funktion maksimointi
# operaattori voi saada annettujen korrelaatio luottamusvälien sisällä.
# Käytetään lauseen 7 esittämää ratkaisua. Palautetaan myös verrattava n-2 arvo.
raja <- function(A, alfa){
  x1 <- luottamusv(A, alfa)
  x2 <- linkit(A, alfa)
  xplus <- 0
  xminus <- 0
  xzero <- 0
  xmin <- 0
  xala <- which.min(abs(x1))
  xyla <- x1[which.min(x1) + 1]
  xjar <- x1[order(x1)]
  for(i in 1 : (length(x1)/2)) {
    if(x1[2 * i - 1] * x1[2 * i] < 0) {
      xzero <- xzero + 1
    }
    else if(x1[2 * i - 1] + x1[2 * i] > 0){xplus <- xplus + 1}
    else{xminus <- xminus + 1}
  }
  xlbound <- vector(length = length(x1)/2)
  for(i in 1 : (length(x1)/2)) {
    if(abs(x1[2 * i]) < abs(x1[2 * i - 1])){xlbound[i] <- x1[2 * i]}
    else{xlbound[i] <- x1[2 * i - 1]}
  }
  d <- abs(xlbound)
  xlbjar <- d[order(d)]
  xsumma <- sum(xlbjar)
  if(xzero == 0) {
    if(xminus%%2 == 1){xmin <- xsumma}
    else if(xyla != xjar[2]){xmin <-
      xsumma - xlbjar[1] - xlbjar[2]}
    else{xmin <- xsumma - 2 * xlbjar[1]}
  }
  if(xzero >= 2) {
    for(i in 1 : (length(x1)/2)) {
      if(x1[2 * i] * x1[2 * i - 1] > 0){xmin <-
        xmin + min(abs(x1[2 * i]), abs(x1[2 * i - 1]))}
    }
  }
  if(xzero == 1) {
    minus = 0
    plus = 0
    summa = 0
    minraja = 1
  }
}

```

```

for(i in 1 : (length(x1)/2)) {
  if(x1[2 * i - 1] * x1[2 * i] < 0) {
    minus = min(x1[2 * i - 1], x1[2 * i])
    plus = max(x1[2 * i - 1], x1[2 * i])
  }
  else {
    summa <- summa + min(abs(x1[2 * i - 1]), abs(x1[2 * i]))
    minraja <- min(minraja, min(abs(x1[2 * i - 1]),
    abs(x1[2 * i])))
  }
}
if(xminus%%2 == 1) {
  xmin <- summa - min(minraja, abs(minus))
}
if(xminus%%2 == 0) {
  xmin <- summa - min(minraja, abs(plus))
}
}
for(i in 1 : (length(x2)/2)) {
  xmin <- xmin - max(abs(x2[2 * i - 1]), abs(x2[2 * i]))
}
xret <- c(xmin, length(x1)/2 - 2)
return(xret)
}
# Lasketaan matriisille testisuure ilman luottamusvälejä.
raja2 <- function(B) {
  X1 <- vector(length = (ncol(B)/2))
  for(i in 1 : (ncol(B)/2)) {
    X1[i] <- QC(B[, 2 * i - 1], B[, 2 * i])[1]
  }
  X2 <- vector(length = ncol(B)/2)
  for(i in 1 : (ncol(B)/2 - 1)) {
    X2[i] <- QC2(B[, 2 * i], B[, 2 * i + 1])[1]
  }
  X2[ncol(B)/2] <- QC2(B[, 1], B[, ncol(B)])[1]
  xsum <- -0
  if(prod(X1) <= 0) {xsum <- sum(abs(X1))}
  else {xsum <- sum(abs(X1)) - 2 * min(abs(X1))}
  for(i in 1 : (length(X2)/2)) {
    xsum <- xsum - max(abs(X2[2 * i - 1]), abs(X2[2 * i]))
  }
  return(xsum)
}
}

```

```

# Bootstrap ajo R kertaa matriisille A.
# Return: raja2 arvo kaikille R otokselle matriisista A.
bootstrap1 <- function(A, R) {
  x1 <- vector(length = R)
  ind <- A
  for(i in 1 : R) {
    for(j in seq_len(ncol(A)/2)) {
      ind2 <- sample(nrow(A), replace = TRUE)
      ind[, (2 * j - 1) : (2 * j)] <- A[ind2, (2 * j - 1) : (2 * j)]
    }
    x1[i] <- raja2(ind)
  }
  return(x1)
}

# Matriisille A tehdylle R kertaiselle bootsrap ajolle alfa-tason
# luottamusvälin alaraja.
bootstrap2 <- function(A, alfa, R) {
  a <- quantile(bootstrap1(A, R).alfa/2)
  ret <- c(a, ncol(A)/2 - 2)
  return(ret)
}

```