Cramér-Rao típusú becslések a kvantumstatisztikában

Szakdolgozat

Készítette

Gröller Ákos
Eötvös Loránd Tudományegyetem
Természettudományi Kar
Matematikus szak

Témavezető

Dr. Petz Dénes tanszékvezető egyetemi tanár
Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi
Egyetem, Matematika Intézet
Analízis Tanszék

2003.

Tartalom

1. Bevezetés **2**

1.1. Kvantumállapotok, mérés matematikai modellje . . . 2

1.2. Állapot a mérés után. Kvantum–„műszerek” . . . 9

1.3. Klasszikus vs. kvantum-statisztika. Műszerek kompatibilitása . . . 12

2. Az operátor-formalizmus **15**

2.1. Nyomoperátorok és Hilbert-Schmidt operátorok . . . 15

2.2. Kvantumállapothoz rendelt $\mathfrak{L}^2$ terek . . . 18

2.3. Véges második momentumú mérések. Határozatlansági reláció . . . 22

2.4. Négyzetesen összegezhető operátorok mátrix-reprezentációja . . . 24

2.5. Állapot kommutátor-operátora . . . 26

3. Cramér–Rao egyenlőtlenség a klasszikus statisztikában **28**

3.1. Elégségesség, teljesség, exponenciális család . . . 28

3.2. Cramér–Rao-tétel, Fisher-féle információs határ . . . 30

4. Kvantum Fisher-információ **32**

4.1. Kvantum teljesség és elégségesség . . . 32

4.2. Exponenciális és transzformációs kvantum-modellek . . . 33

4.3. Paraméterek becslése méréssel . . . 36

4.4. Cramér–Rao tétel egydimenziós állapotcsaládra . . . 36

5. A kvantum Fisher-információs határ általánosításai **43**

5.1. Csencov unicitási tétele a kommutatív esetre . . . 43

5.2. Kvantumállapotok monoton Riemann-metrikái . . . 45

5.3. Dualitás kovariancia és Fisher-információ között . . . 49

5.4. A Bhattacharyya-határ . . . 51

A. Függelék **58**

A.1. Technikai kiegészítések . . . 58

A.2. Jelölések és konvenciók . . . 59

A dolgozat szerkezete

Célunk a kvantumfizikai mérések statisztikai megközelítésének – a téma méretéhez képest persze csak vázlatos – áttekintése. A fő fogalmak bemutatása mellett a mérés segítségével megvalósított becslések szóródására vonatkozó alsó korlátok, ezen belül a Cramér–Rao típusú, információs mátrixokra épülő határok témakörét részletesebben taglaljuk. Ennek (egyik) alternatíváját, a határozatlansági relációra épülő alsó becsléseket szintén érintjük, de mélységeibe nem megyünk bele.

Felépítésünk a következő. Először a mérés kvantumfizikai modelljét mutatjuk be olyan mértékig, amennyire a későbbiekben azt – konkrét matematikai lépéseknél, vagy azok értelmezésénél – igényelni fogjuk.

Ezután az operátor-formalizmus – főleg végtelen dimenziós esetben fontos – egyes technikai részleteit elemezzük. Ezek segítségével későbbi eredményeink pontosabban és általánosabban ragadhatóak meg.[1]

Következőnek a klasszikus statisztika Cramér–Rao egyenlőtlenségének általános és Fisher-információs határként ismert speciális esetét fogalmazzuk meg. Egy sor kapcsolódó tételt és fogalmat említés szintjén szerepeltetünk, egyrészt összehasonlítási alapot, másrészt motivációt szolgáltatva a kvantumos megfelelőkhöz. Ezek közös vonása, hogy a statisztikai modellben, a mintában vagy a statisztika szerinti feltételes eloszlásban rejlő információ mennyiségének viszonyait boncolgatják.[2] Kiemelendő az információs határ elérhetőségét karakterizáló tétel, mely a kvantumos esetben igen hasonló formában teljesül.

A negyedik fejezetet a klasszikus statisztika előzőekben felsorolt elemeinek kvantumos válatozatai alkotják. Az egydimenziós esetben részletesen elemezzük a Fisher-információs határ mibenlétét és elérhetőségét, néhány kiegészítő megjegyzést téve a többdimenziós esetről.

A záró szakasz a Fisher-információ általánosításairól szól. A többdimenziós eset kezelését így az eredeti és az általánosított változatokra egyidejűleg végezhetjük. Kifejtjük az általánosítások geometriai jelentését, a Fisher-információ és a kovariancia szoros kapcsolatát. Végül bemutatjuk, hogy az előzőekben ismertetett technikák felhasználásával hogyan építhető fel a klasszikus statisztika Fisher-információs határának egyik élesítése, a Bhattacharyya-határ megfelelője kvantumállapotok családjainak esetére. A becslés „lényegét" és a technikai részleteket tétellé és jelöléssé bontva jól látható, hogy mind az elérhetőségről szóló tétel, mind a Fisher-információ korábban definiált általánosításai elenyésző módosításokkal használhatóak a Bhattacharyya-határ kapcsán is.

Elsősorban azok a tételek és állítások kerültek bizonyításra, melyek a felépítés alapvető elemei; a hivatkozott művekben nem, illetve csak nagyon vázlatosan szerepelnek; a tipikus technikákat szemléltetik. A nem igazoltak vagy „közismertek" eredményei, vagy a hivatkozott mű ad rájuk bizonyítás. A terjedelem szempontjain túl az is emellett szól, e területen a bizonyításoknál gyakran maguk a definíciók, fogalmak, konstrukciók ragadják meg a probléma magját. Ezekre végig nagy hangsúly kerül.

A függelék néhány olyan apróságot tartalmaz, melyekkel nem akartuk megszakítani a fő részeket, de kimondott alakjukban – és nem irodalmi hivatkozásként – akartunk utalni rájuk. Ide került a jelölések jegyzéke is. Legutolsó elemünk az elengedhetetlen bibliográfia.

[1] A fő irányvonaltól eltér a második fejezet utolsó két, egymásra épülő pontja. Ezek azért kerültek mégis bele a fejezetbe, mert a kommutátor-operátor egyrészt mind a Schrödinger-egyenletnél, mind a határozatlansági relációkkal kapcsolatos – itt be nem mutatott – becsléseknél fontos szerepet játszik, másrészt mert a későbbi $\mathbf{J}_S$ formalizmussal rokon konstrukció.

[2] Magára az információ-elméletre nem térünk ki.

1. Bevezetés

Elsőként a kvantumfizikai modellezés számunkra fontos konstrukcióit, tulajdonságait és az ezekre épülő valószínűségi és statisztikai modellezés alapfogalmait mutatjuk be.

1.1. Kvantumállapotok, mérés matematikai modellje

Egy fizikai rendszer lehetséges állapotait egy $\mathcal{H}$ (szeparábilis) Hilbert-tér 1 nyomú, pozitív önadjungált operátoraival jellemezzük, melyek halmazát $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ jelöli. Ezt a rendszer statisztikus operátorának avagy – főleg véges dimenzió esetén – sűrűségmátrixának nevezzük.

> A $\mathcal{H}$ tér választása izomorfia szempontjából csupán a dimenzió megadását jelenti. A rendszerrel kapcsolatos konkrét eredmények viszont gyakran egy alkalmasan választott Hilbert-tér reprezentációban fogalmazhatóak meg „elegánsan”[1]
>
> A kvantumjelenségek sztochasztikus viselkedésének Hilbert-terek segítségével való leírása elsőre meglepőnek tűnhet – [KM98] több alapvető kvantum-jelenség (köztük az elhíresült Aspect-kísérlet) részletes tárgyalását és értelmezését adja, közben kiemelve azokat a motívumokat, melyek természetes ötletként hívják életre a Hilbert-teres megközelítést. Bár a kvantumelmélet „filozófiai” értelmezése mindig is számos vita forrása volt és vélhetőleg még sokáig az is lesz, a formalizmus mint eszköz remekül bevált, a számszerű kísérleti eredményekkel összhangban van, így ex post érvek is szólnak a használata mellett.

Az önadjungált operátorok spektrálfelbontása alapján minden S statisztikus operátor felírható $S = {}^{(\mathrm{s})}\sum_n s_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ alakban, ahol $s_n \in \mathbb{R}_\oplus$, $\sum_n s_n = \operatorname{Tr} S = 1$ és a ψ_n elemek teljes ortonormált rendszert alkotnak $\mathcal{H}$-ban. Ez alapján kitüntetett szerepűek a $|\psi\rangle\langle\psi|$ alakú statisztikus operátorok, azaz az egydimenziós projektorok: ezek adják $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ extremális pontjait, halmazukra az $\vec{\mathfrak{S}}(\mathcal{H})$ jelöléset vezetjük be. A megfelelő állapotokat *tiszta*, a többit *kevert állapotnak* hívjuk. Megjegyezzük, hogy tiszta állapotnál a megfelelő $\psi \in \mathcal{H}$ elemet állapotvektornak avagy – mivel $\mathcal{H}$ gyakran függvénytér – állapotfüggvénynek szokás nevezni. Ez egy fázisnak nevezett konstans szorzótól eltekintve egyértelmű.

$\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ topológiai határát azon elemei adják, melyeknek van 0 sajátértéke. A topológiai határ $\dim \mathcal{H} > 2$ esetén határozottan bővebb az extremális határnál. $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ belső pontjai a *hű állapotok*, melyek minden sajátértéke pozitív, vagyis $\mathcal{R}(S) = \mathcal{H}$.

1.1. Definíció (OProM, PProM). Legyen $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$ mérhető tér. Az $M : \mathcal{A} \mapsto \mathbb{SA}_\oplus(\mathcal{H})$ leképezés *pozitív operátor értékű valószínűségi mérték (OProM)*, ha teljesíti a következőket:

- $M(\mathcal{X}) = \mathbf{1}_\mathcal{H}$ az identitás $\mathcal{H}$-n;
- ${}^{(\mathrm{w})}\sum_n M(A_n) = M\left(\bigcup_n A_n\right)$ minden megszámlálható sok, páronként diszjunkt mérhető halmazból álló $(A_n) \subset \mathcal{A}$ rendszerre. A pozitivitás miatt ekkor az összeg erősen is konvergens.

[1] Fizikai alkalmazásokban tipikus a p kanonikus koordinátákkal paraméterezett tér Borel-halmazai feletti $\mathfrak{L}^2_\mathbb{R}$ terek használata, ahol a szimmetriák ábrázolásai az alaptér szimmetriái által indukáltak. Ld. még a 4.7 utáni részt.

Használatos még az általánosított avagy *nem-ortogonális egységfelosztás* elnevezés is.

Ennek speciális esete a *projektor értékű (valószínűségi) mérték (PProM)* avagy *(ortogonális) egységfelosztás*, amikor minden $A \in \mathcal{A}$ halmaz mértéke $\mathcal{H}$ egy projektora. Ekkor diszjunkt halmazok mértéke merőleges projektorokat kell adjon, hogy összegük ne haladja meg $M(\mathcal{X}) = \mathbf{1}_{\mathcal{H}}$-t, következésképp M képe disztributív részobjektuma $\mathfrak{P}(\mathcal{H})$-nak. A diszjunkt halmazok mértékére vonatkozó ortogonalitás elegendő is ahhoz, hogy M értékkészlete $\mathfrak{P}(\mathcal{H})$-ba essen.

A továbbiakban M tetszőleges OProM, E pedig tetszőleges PProM jelölésére fog szolgálni. $E(A)$ helyett gyakran $E_{[A]}$-t írunk.

A 2.8 megjegyzésben foglaltak szerint a vizsgált OProM-ok osztályát gyakran szűkíteni fogjuk.

Egy OProM-hoz definiálhatjuk $f : (\mathcal{X}, \mathcal{A}) \to (\mathbb{C}, \mathcal{B}(\mathbb{C}))$ mérhető függvények $I = \int f(x) M(\mathrm{d}x)$ integrálját, amely egy $\mathcal{H}$-n ható operátor lesz, amennyiben értelmes. A konstrukciót akár közelítő összegek segítségével, akár a $\varphi(I) = \int f(x)\varphi\big(M(\mathrm{d}x)\big) \quad \big(\varphi \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})^*\big)$ kikötésrendszerrel felépíthetjük – utóbbi kapcsán lásd még a 2.3 tétel előtti megjegyzést. Szokványos technikával igazolható, hogy ha egy $\mathcal{L}^\infty(\mathcal{X}, \mathcal{A}) \to \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ leképezés folytonos, lineáris, egységtartó és pozitív, akkor előáll ilyen alakban.

1.2. Definíció. *A rendszeren végzett $\mathcal{X}$-beli értékű mérés alatt egy $M : \mathcal{A} \to \mathbb{SA}_\oplus(\mathcal{H})$ OProM-ot értünk, ahol $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$ mérhető tér. A mérés megismételhető avagy Neumann-féle, ha M projektor értékű. Egyszerű mérésről akkor beszélünk, ha M projektor értékű és $\mathcal{X}$ véges halmaz.*[2] *Ha $\mathcal{X}$ véges, akkor feltehető, hogy $\mathcal{A} = 2^{\mathcal{X}}$, ilyenkor ezt a kényelem kedvéért elvárjuk.*

A definícióban szereplő mérhető tér a legtöbb esetben egy lokálisan kompakt T_2-tér a Borel σ-algebrával. Ezen belül is leginkább $\mathbb{R}, \mathbb{R}^n, \mathbb{C}, \mathbb{C}^n$ részhalmazai fordulnak elő: egy „valódi" mérés eredményeként általában egy vagy több valós számot várunk.

Valójában egy mérés persze egy olyan „valami", amely a rendszer állapotától függően egy $\mathcal{X}$-beli értéket szolgáltat. A tapasztalatok szerint azonban a kimenetel még a rendszer állapotának (tetszőlegesen pontos) ismerete esetén is sztochasztikus jellegű: a mérés nem egy konkrét $\mathcal{X}$-beli elemet rendel az állapothoz, hanem egy valószínűség-eloszlást. Megköveteljük, hogy a hozzárendelés affin legyen, azaz állapotok keverése az eredménybeli eloszlások keverését eredményezze. Ez egyrészt megfelel a szemléletünknek, másrészt összhangban áll a kísérleti tapasztalatokkal.

1.3. Tétel (Gleason). *Legyen $S \mapsto \mu_S$ affin leképezés $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$-ból az $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$ mérhető tér valószínűségi mértékeinek halmazába. Ekkor egyértelműen létezik olyan $M : \mathcal{A} \to \mathbb{SA}_\oplus(\mathcal{H})$ OProM, amelyre*

$$\mu_S(A) = \operatorname{Tr} SM(A) \qquad \forall A \in \mathcal{A} \qquad (\forall A \in \mathcal{A})\,.$$

A bizonyítás, mely az $\mathfrak{L}^p$–$\mathfrak{L}^q$ dualitási tételek szokásos technikáit alkalmazza, megtalálható a [Hol82] könyvben. □

Ezen tétel alapján tudtuk tehát a méréseket OProM formájában megadni. Annak valószínűségére, hogy az M OProM által megadott mérést elvégezve a $S \in \mathfrak{S}(\mathcal{H})$ állapotban lévő rendszeren az eredmény az $A \in \mathcal{A}$ halmazba esik, a következő jelölést vezetjük be:

$$\mathbf{P}_S^M(A) \triangleq \operatorname{Tr} SM(A)\,.$$

[2] [Hol82] szóhasználatában az egyszerű mérés az, amit mi Neumann-félének hívunk.

A valós értékű Neumann-féle mérések esetén ezt tovább egyszerűsíthetjük: legyen $E : \mathcal{B}(\mathbb{R}) \to \mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H})$ PProM. Ekkor a $Q = \int xE(\mathrm{d}x)$ képlet megad egy Q önadjungált operátort $\mathcal{H}$-n, amelynek spektrálmértéke E (és amely korlátos, haz E korlátos tartójú, valamint ekkor az integrál erősen konvergens). Ekkor az $\mathbb{R}$ feletti $\operatorname{Tr} SE(\,\cdot\,)$ valószínűségi mérték várható értéke $\operatorname{Tr} SQ$ (ha legalább az egyik létezik).

1.4. Definíció. A fenti Q operátor az E Neumann-féle méréshez tartozó *obszervábilis* avagy *dinamikai változó*. Q mérése alatt ilyenkor az E mérést értjük.

Amennyiben M nem PProM ugyan, de előáll egy sűrűn definiált Q szimmetrikus operátor spektrálmértékeként, Q és M kapcsolata analóg módon írható le, ld. az A.1 tételt. Ezért az obszervábilis fogalmában ezen eseteket is megengedjük, ekkor Q mérése persze M-et jelenti.

1.5. Definíció. Két PProM *felcserélhető*, ha értékkészletük bármely két eleme felcserélhető. Önadjungált, vagy lényegében önadjungált operátorok felcserélhetőek, ha spektrálmértékeik azok. Ismert, hogy ez ekvivalens azzal, hogy előállnak egyetlen (lényegében) önadjungált operátor (valós) függvényeként.

1.1.1. Felcserélhető állapotok; keverés és szuperpozíció

Válasszuk ki $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ két tiszta állapotát, legyenek ezek $S_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ és $S_\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$. Tekintsünk most úgy rájuk, mint mérési eljárásokhoz kimeneteli eloszlásokat rendelő objektumokra. A klasszikus valószínűségszámítás és statisztika esetében egyértelmű lenne két ilyen operációhoz találni egy harmadikat, ami „félúton van a kettő között”: a két állapot affin keveréke $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ súlyokkal. Ez természetesen most is rendelkezésünkre áll: $\frac{1}{2}S_\psi + \frac{1}{2}S_\varphi \in \mathfrak{S}(\mathcal{H})$ és bármely méréshez az eredeti kimeneteli eloszlások keverékét rendeli. De nevezhetünk köztes állapotnak olyan tiszta állapotot is, melynek állapotvektora egyenlő súlyú kombinációja a ψ és φ vektoroknak: $\frac{|\psi+\varphi\rangle\langle\psi+\varphi|}{\langle\psi+\varphi|\psi+\varphi\rangle}$. Ezt – és a más súlyokkal hasonlóan kapott további vektorokhoz tartozó tiszta állapotokat – a két állapot *szuperpozíciójának* nevezzük.[3] A szuperponált állapoton végzett mérés kimenetelének eloszlása jellemzően nincs semmilyen közvetlen kapcsolatban a kiinduló állapotok méréséből származóakkal. A szuperpozíció egy jellegzetes tulajdonsága, hogy kommutatív sűrűségi operátorokból is olyat nyerhetünk általa, mely az eredetiekkel nem felcserélhető – következő megjegyzésünk alapján a szuperpozíció jellegzetes „kiút” a klasszikus valószínűség-számítás területéről.[4]

1.6. Megjegyzés. Ha csak egyidejűleg diagonalizálható állapotokra és PProM-okra szorítkozunk, akkor gyakorlatilag a klasszikus statisztikát kapjuk vissza:[5] az állapotok összessége a bázisvektorok megszámlálható halmazának valószínűségi mértékei, a mérések pedig e halmaz felett értelmezett függvények. Mivel az egyszerre diagonalizálhatóság a kommutativitással ekvivalens, a klasszikus valószínűségszámításra és statisztikára a kvantumos változatok tárgyalásánál gyakran mint a kommutatív esetre hivatkozunk.

[3] Vegyük észre, hogy itt igenis van szerepe a két állapotvektor fázisának.

[4] Nincs is olyan „gyakorlati módszer” amellyel két előállítható állapot szuperponáltját általánosan elő tudnánk állítani. A keverés megvalósítható úgy, hogy p_i eséllyel az S_i állapotú rendszert hozzuk létre. Szuperponált tiszta állapotok inkább úgy „jönnek létre”, hogy $\mathcal{H}$-ban olyan bázist választunk – például a mérés obszervábilisének sajátbázisát – amelyben a vizsgálandó állapot-operátor nem diagonális. A kevert állapot objektív fogalom, a szuperpozíció inkább terminus technicus kategóriába esik. Például az Aspect-kísérlet ([ADR82a], [ADR82b]) eredményeit paradoxnak érző klasszikus megközelítés és a kvantummechanikai magyarázat közti különbséget jól meg lehet fogalmazni úgy, hogy az első kevert állapotot keres ott, ahol valójában szuperpozícióról van szó.

[5] Legalábbis a diszkrét esetet. σ-véges mértéktér feletti abszolút folytonos eloszláscsaládoknál a lépcsősfüggvénnyel való approximálhatóság miatt OProM-ok segítségével ennél tágabb osztályok közt is létesíthetnénk megfeleltetést, ám illusztrálás céljára a diszkrét eset egyébként is szemléletesebb, ezért e technikai kérdéskört inkább elkerüljük.

1.1.2. Összetett rendszerek

A több részből összeálló rendszerek leírása a megfelelő Hilbert-terek tenzorszorzatára épül. Mivel a később fontos szerepet játszó teljes pozitivitásra vonatkozó kritériumokat épp ennek alapján fogadjuk majd el, röviden összefoglaljuk, hogyan adódik maga a tenzorszorzat. Nyilván nem lehet „bebizonyítani", hogy csakis ez lehet a megfelelő konstrukció, de látni fogjuk, hogy meglehetősen természetes és egyszerű kritériumok automatikusan ehhez vezetnek. Az áttekinthetőség kedvéért ennek tárgyalásánál csak kétrészes rendszerekkel foglalkozunk.

Tekintsünk két kvantumrendszert, melyeket a $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ Hilbert-terek segítségével írunk le. Az ezekhez tartozó állapotokból és mérésekből kiindulva szeretnénk a két elem együtteseként adódó rendszer lehetséges állapotait és méréseit felépíteni.

Kiemeljük, hogy ehelyütt a direkt szorzat jelével – a mérhető terek kivételével – minden esetben a megfelelő halmazok „struktúra nélküli" direkt szorzatát jelöljük majd.

A következő ábra függőleges nyilai nagyjából összefoglalják, hogy milyen leképezéseket szeretnénk megadni. Elvárjuk azt is, hogy mindegyik injekció legyen: az összetett rendszer ne jelentsen információ-veszteséget részeinek összességéhez képest. Mivel kezdetben csak az önálló rendszerek modelljével rendelkezünk, a felső sorban mindenütt a megfelelő rendszerek „független" objektumaiból képzett párok szerepelnek.

$$
\begin{tikzcd}
\begin{array}{c}\mathfrak{M}^{\mathcal{X}_1}(\mathcal{H}_1)\times_1\mathfrak{M}^{\mathcal{X}_2}(\mathcal{H}_1)\\ M_1(\mathrm{d}x_1), M_2(\mathrm{d}x_2)\end{array} \arrow[d, "\iota^{\mathcal{X}}_{\boldsymbol{M}}"'] & \begin{array}{c}\mathcal{H}_1\times\mathcal{H}_2\\ |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle\end{array} \arrow[l] \arrow[r] \arrow[d, "\iota_{\boldsymbol{H}}"'] & \begin{array}{c}\vec{\mathfrak{S}}(\mathcal{H}_1)\times\vec{\mathfrak{S}}(\mathcal{H}_2)\\ |\psi_1\rangle\langle\psi_1|, |\psi_2\rangle\langle\psi_2|\end{array} \arrow[d, "\iota_{\boldsymbol{S}}"'] \arrow[r, "\text{keverés}", "\text{affinitás}"'] & \begin{array}{c}\mathfrak{S}(\mathcal{H}_1), \mathfrak{S}(\mathcal{H}_2)\\ S_1, S_2\end{array} \arrow[d, "\iota_{\boldsymbol{S}}"'] \\
\begin{array}{c}\mathfrak{M}^{\mathcal{X}}(\mathcal{H})\\ M(\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2)\end{array} & \begin{array}{c}\mathcal{H}\\ |\psi\rangle\end{array} \arrow[l] \arrow[r] & \begin{array}{c}\vec{\mathfrak{S}}(\mathcal{H})\\ |\psi\rangle\langle\psi|\end{array} \arrow[r, "\text{keverés}", "\text{affinitás}"'] & \begin{array}{c}\mathfrak{S}(\mathcal{H})\\ S\end{array}
\end{tikzcd}
$$

Az állapotok halmazán a klasszikus keveréssel kompatibilis megfeleltetést várunk: az egyik komponens állapotát rögzítve, a másikét néhány lehetőség közül véletlenszerűen választva az egész rendszer a lehetséges közös állapotok keverése legyen. Vagyis $\iota_{\boldsymbol{S}}$ mindkét koordinátában affin. Tiszta állapotok párjának képeként tiszta állapotot várunk: ha a független részek nem tartalmaznak klasszikus véletlen elemet – nem állíthatóak elő nemtriviális keveréssel –, akkor az egész se tartalmazzon. Az állapotok bilineáris beágyazása így átjátszható a tiszta állapotok képterének egységköreinek bilineáris leképezésére. Már csak a fázis tart minket vissza attól, hogy $\iota_{\boldsymbol{H}}$-t jellemezhessük – előbb lássuk a méréseket.

Egy PProM megadása ekvivalens egy ortonormált bázis elemeihez tartozó tiszta állapotok és a megfelelő kimenetelek megadásával. Így $\iota_{\boldsymbol{S}}$ a PProM-ok tekintetében megadja $\iota_{\boldsymbol{M}}$-et is és PProM-párhoz PProM-ot rendel. Amint az állapotokat, úgy a méréseket is választhatjuk véletlenszerűen, ami szintén a kimeneteli eloszlások klasszikus keverését eredményezi – ezt szintén szeretnénk komponensenként megőrizni, így $\iota_{\boldsymbol{M}}$ affin volta adódik. Most már a PProM-ok halmazának affin burka felett $\iota_{\boldsymbol{S}}$ és $\iota_{\boldsymbol{M}}$ „konzisztensek".

Következő elvárásunk $\iota_{\boldsymbol{M}}$ valamiféle folytonossága az OProM-okon értelmezett eloszlásbeli konvergenciára nézve – melyet eszünk ágában sincs precízen definiálni. Amit e konvergencia-fogalomtól célszerű elvárnunk, az az, hogy az extremális mérésekből Choquet-integrálként megkapjuk az összes mérést, ugyanis minden extremális mérés PProM. Így az affinitás és folytonosság így a teljes $\iota_{\boldsymbol{M}}$-et meghatározza.

Most már egyetlen bánatunk, hogy $\iota_{\boldsymbol{H}}$ leképezést egyelőre csupán a fázistól eltekintve tudunk megadni.[6] Két választásunk van. Az egyik, hogy a fázisnak – és így a szuperpozíciónak – nincs fizikai tartalma, tehát úgy írjuk elő, ahogy akarjuk. A másik az, hogy van, ez esetben a szuperpozíciót is konzisztensen kell transzformálnunk. Utóbbi lényegében azt jelenti, hogy a fázist egyetlen $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2$-beli páron megadva az egész direkt szorzaton előírtuk és így kapunk egy lineáris $\iota_{\boldsymbol{H}}$ beágyazást. Előbbi azt, hogy semmi sem gátol minket lineáris $\iota_{\boldsymbol{H}}$ választásában.

[6] Már ez is nagy előrelépés ahhoz képest, hogy kezdetben akár bármiféle $\iota_{\boldsymbol{H}}$ létét is megkérdőjelezhettük volna, hiszen a mögöttes Hilbert-tér nem olyan konktét objektum, hogy bármit közvetlenül előírhatnánk $\mathcal{H}_1$, $\mathcal{H}_2$ és $\mathcal{H}$ kapcsolatáról.

Összefoglalva: eljutottunk egy (változónként) lineáris $\iota_{\boldsymbol{H}}$-ig, a többi beágyazás pedig ezzel konzisztens és belőle meghatározható.

Az információ megőrződését úgy megfogalmazva, hogy amiknek a képe nem szükségszerűen azonos a linearitás alapján, azoké ne is legyen az, $\iota_{\boldsymbol{H}}$ képének Hilbert-tér burkát azonosítjuk a $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ tenzorszorzattal. Azon elvárás, hogy az összetett rendszer leírásába ne kerüljön semmi, ami nem a két részből származik, értelmezhető úgy, hogy $\mathcal{H}$ pontosan ez a tenzorszorzat legyen.

Tekintsük át, mit hoztunk létre. $\iota_{\boldsymbol{H}}(S_1, S_2) = S_1 \otimes S_2$ azt az állapotot írja le, amikor a két rendszer egymástól függetlenül a megfelelő állapotokban van. Hasonlóan $(M_1 \otimes M_2)(A_1 \times A_2) \triangleq M_1(A_1) \otimes M_2(A_2)$ az az „esemény", hogy a komponensenként függetlenül végzett M_i mérések eredménye rendre A_i-be esik. A komponensenként függetlenül végzett mérés fogalma persze megkérdőjelezhető, ha az eredeti állapot nem a két rész függetlenségét írja le, vagyis nem $S_1 \otimes S_2$ alakú. Ha azonban igen, akkor szerencsésen

$$\mathbf{P}^{M_1 \otimes M_2}_{S_1 \otimes S_2}(A_1 \times A_2) = \mathbf{P}^{M_1}_{S_1}(A_1) \cdot \mathbf{P}^{M_2}_{S_2}(A_2) \ ,$$

független rendszereken végzett független mérések független kimenetelt eredményeznek. Ezt reméltük is. Most már jöhet a…

1.7. Definíció. Legyenek adottak az $\mathfrak{S}(\mathcal{H}_i) \quad \big(i \in I\big)$ állapothalmazokkal leírt részrendszerek. Ekkor az egész rendszer jellemzéséhez a $\mathcal{H} \triangleq \bigotimes_i \mathcal{H}_i$ tenzorszorzat-teret használjuk. Az egyes részek $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ tiszta állapotaihoz tartozó $S_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad \big(|\psi\rangle = \otimes_i |\psi i\rangle\big)$ szorzatállapotot *szeparábilis* avagy *szeparált tiszta állapotnak* hívjuk, minden más tiszta állapot *csatolt* avagy *összekapcsolódott*. Egy kevert állapot akkor szeparált, ha előáll *szeparált tiszta szorzatállapotok keverékeként*, egyébként csatolt.[7]

A részrendszerekre külön-külön ható $M_i(\mathrm{d}x_i)$ mérések együttese $M(\mathrm{d}^n x) \triangleq \bigotimes_i M_i(\mathrm{d}x_i)$. Ezen „szorzat alakú" M-et az $S = \bigotimes_i S_i$ szorzatállapotban elvégezve a kimeneteli eloszlásban az egyes komponensekre vonatkozó koordináták függetlenek és a $\mathbf{P}^{M_i}_{S_i}$ marginális eloszlást követik – röviden: $\mathbf{P}^{\otimes_i M_i}_{\otimes_i S_i} \equiv \bigtimes_i \mathbf{P}^{M_i}_{S_i}$.

1.1.3. A Schrödinger-egyenlet

Egy kvantum-rendszer állapota időben változik, legalábbis változhat. Az idő hatását általában az

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

Schrödinger-egyenlettel írjuk le, ahol $|\psi\rangle$ a rendszer állapot-függvénye egy tiszta állapotban, H pedig a Hamilton-operátor, avagy energia-operátor.[8] Egy fizikai rendszer Hamilton-operátorának megadásához elsősorban fizikusokra hagyatkozhatunk.[9] Ennek megválasztása különböző elvek és szabályok betartásával történik, a rendszer formális megadásának talán legfontosabb eleme a Hamilton-operátor felírása más „elemibb" jellemzők obszervábiliseinek függvényeként.[10] Fontos elv, hogy H mindenképpen valós, ezen belül szigorúan pozitív spektrumú.

[7] Vegyük észre, hogy *nem* azok a szeparált kevert állapotok, melyek $\otimes_i S_i$ alakúak. Később utalunk ennek okára.

[8] Ez már egy speciális alak arra az esetre, amikor az állapotot valamilyen $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}\big(D \times (t_1, t_2)\big) \quad \big(t_1, t_2 \in \bar{\mathbb{R}}\big)$ függvénytér elemeként repezentáljuk és az idő operátora a t független változóval való szorzás operátora. Általában az idő T és az energia H operátorának ellentettje közt a kanonikus felcserélési reláció – valamely formájának – teljesülését írjuk elő. Annak részletes értelmezéséhez, hogy az idő is csak egy obszervábilis a sok közül, több okból is csak a kvantumelmélet fizikai irodalmának – ld. a következő lábjegyzetet – tanulmányozását javasolhatjuk az olvasónak.

Egyrészt, hosszadalmas és szinte minden egyenletet, tételt, szót, amihez kapcsolódik az idő fogalma, csak roppant körültekintéssel lehetne úgy kimondani, hogy az valóban korrekt legyen. Másrészt az értelmezés maga sem mindenben egységes a tudományterület művelői közt. Harmadrészt e sorok írója sem annyira tájékozott e témakörben, hogy ismertetésére vállalkozzon.

[9] A számtalan idevágó mű közül [Mar71] és [FLS70] különösen említésre méltó és magyar nyelvű. [Hol82] példái úgyszintén értékesek.

[10] Az „elemibb" itt gyakran úgy is értelmezhető, hogy ezen operátorokat a konkrét Hilbert-térhez kapcsolódó szimmetria-tulajdonságaik lényegében egyértelműen meghatározzák. Ld. a 4.7 definíció utáni részt.

E dolgozatban az energia operátorának képletét – még ha esetleg hivatkozás nélkül is – mindig más művek példái, eredményei alapján „készen kapjuk” a rendszer leírásával.

A Schrödinger egyenletet a megoldásával helyettesítve, a t időpontbeli állapotfüggvény $|\psi_t\rangle$-vel jelölve

$$|\psi_t\rangle = e^{t\cdot H/(\mathrm{i}\hbar)}\,|\psi_0\rangle \ ,$$

illetve a megfelelő sűrűség-operátorra

$$S_t = e^{-\mathrm{i}t\cdot H/\hbar} S_0 e^{\mathrm{i}t\cdot H/\hbar} \ . \tag{1.1}$$

Mivel a klasszikus keverést az időfejlődéssel is felcserélhetőnek tekintjük, ez utóbbi képlet az affinitás miatt kevert állapotokra is fennáll. Az állapot differenciál-egyenletét megkapjuk, ha tiszta állapotokban alkalmazzuk szorzat differenciálási szabályát, majd az eredményt a linearitás segítségével kiterjesztjük az összes állapotra:[11]

$$\mathrm{i}\hbar\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S = [H, S] \ . \tag{1.2}$$

Egy összetett rendszer H Hamilton-operátora *szeparált* avagy *kölcsönhatás-mentes*, ha előáll $\sum_i(\cdots\otimes \mathbf{1}_{i-1}\otimes H_i\otimes \mathbf{1}_{i+1}\otimes\cdots)$ alakban. Ha nem ilyen alakú, akkor a Schrödinger-egyenlet megoldása legfeljebb metszheti a szeparált állapotok alkotta alteret $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$-ban, de nem érintheti – a rendszer gyakorlatilag soha nincs szeparált állapotban.[12] A Hamilton-operátor fizikai értelmezése összhangban van a szeparáltság fenti definíciójával, ami viszont a szeparált állapotok elsőre meglepőnek tűnő definícióját támasztja alá: lazán fogalmazva ezek alkotják a szeparált Hamilton-operátorok „természetes” invariáns állapot-osztályát.

1.1.4. Mérés realizációja

1.8. Dilatációs tétel (Naimark). *Legyen $M : \mathcal{A} \to \mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H})$ OProM. Ekkor létezik olyan $\bar{\mathcal{H}}$ szeparábilis Hilbert-tér, amelynek $\mathcal{H}$ zárt altere, továbbá $\bar{\Pi}$-vel jelölve ebben $\mathcal{H}$ projektorát található olyan $E : \mathcal{A} \to \mathbb{SA}_{\oplus}(\bar{\mathcal{H}})$ PProM, amelyre*

$$M(A) = \bar{\Pi}\cdot E(A)\cdot\bar{\Pi} \qquad (\forall A\in\mathcal{A}) \ .$$

1.9. Következmény (Realizációs tétel). *A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér feletti M méréshez található olyan $\mathcal{H}_0$ Hilbert-tér és abban egy tiszta állapotot leíró $S_0 \in \vec{\mathfrak{S}}(\mathcal{H}_0)$ statisztikus operátor, valamint egy $\mathcal{H}_0$ feletti E Neumann-féle mérés, amelyre*

$$\mathbf{P}^M_S(A) = \mathbf{P}^E_{S\otimes S_0}(A) \qquad (\forall A\in\mathcal{A}) \ .$$

A bizonyításokhoz ld. [Hol82, 65–68. o.] □

Azaz minden mérés elvégezhető úgy, hogy a vizsgált rendszerhez csatolunk egy alkalmas, tiszta állapotban lévő rendszert, majd az egész rendszeren végrehajtunk egy Neumann-féle mérést. Ennek az a jelentősége, hogy a Neumann-féle méréseket szokták „fizikailag megvalósíthatónak” tekinteni, valamint azokkal könnyebb számolni. Az előbbi tulajdonság okán az ilyen $(\mathcal{H}_0, S_0, \Pi)$ hármasokat az M mérés realizációjának, megvalósításának nevezzük.

[11] A (2.15) képlettel definiált $\mathfrak{D}_S$ szuperoperátorra tehát $\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}S = S\circ\mathfrak{D}_S H$, többek közt innen ered érdeklődésünk $\mathfrak{D}$ iránt.

[12] Pontosabban: ez így csak hű állapotokra igaz – ha $\mathcal{R}(S)$ véletlenül része egy olyan H-invariáns altérnek, melyen H már a fenti alakú, akkor a szeparábilitás fennmaradhat.

Egy rögzített sűrűségi operátorral való tenzorszorzás teljesen pozitív, nyomtartó lineáris leképezés. Az 5.2 szakaszban foglaltak szerint ezt kvantum-randomizációként, új véletlen elem bevonásaként értelmezzük. A realizációs tétel szerint minden mérés összerakható a kvantum-randomizáció és a Neumann-féle mérés építőelemeiből.

1.1.5. *Sűrűségfüggvény*

Sok esetben egy $M : \mathcal{H} \rightsquigarrow \mathcal{X}$ méréshez tartozó egységosztásnak létezik sűrűségfüggvénye – valamilyen, számunkra vonzó $\mathcal{X}$ feletti σ-véges λ mértékre nézve –, azaz alkalmas $m(x) : \mathcal{X} \to \mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H})$ mérhető leképezésre

$$M(A) = {}^{(\mathbf{s})}\!\!\int_A m(x)\lambda(\mathrm{d}x) \qquad \big(A \in \mathcal{A}\big) .$$

Ekkor a mérési eredmény eloszlása is abszolút folytonos λ-ra nézve és sűrűségfüggvénye

$$f_M(x) = \operatorname{Tr} S m(x) . \tag{1.3}$$

Ha az $M = \bigotimes M_i$ tenzorszorzat alakú mérés komponensei rendre abszolút folytonosak a λ_i mértékekre nézve $m_i(x_i)$ sűrűségfüggvénnyel, akkor $M \ll \lambda \triangleq \times \lambda_i$ és sűrűségfüggvénye $m(x) = \prod m_i(x_i)$.

A következő Radon–Nikodym típusú – ennek megfelelően sztenderd módon belátható – állítás a sűrűségfüggvény létezését biztosítja, ha M nem „túl nagy”:

1.10. Állítás. *Amennyiben az $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$ mérhető téren $\{M(A) | A \in \mathcal{A}\}$ additív operátor-értékű halmazfüggvény, amelyet*

$$\big|\langle\psi|M(A)|\varphi\rangle\big| \le \lambda(A)\, \|\psi\|\, \|\varphi\| \qquad \big(\psi, \varphi \in \mathcal{H},\ A \in \mathcal{A}\big) ,$$

azaz

$$\|M(A)\| \le \lambda(A) \qquad \big(A \in \mathcal{A}\big)$$

értelemben dominál a λ skalármérték, akkor (λ-mm. egyértelműen) létezik olyan $m(x)$ operátor értékű függvény, hogy

$$\langle\psi|m(A)|\varphi\rangle = \int_A \langle\psi|m(x)|\varphi\rangle\, \lambda(\mathrm{d}x) \qquad \big(\psi, \varphi \in \mathcal{H},\ A \in \mathcal{A}\big) ,$$

vagyis

$$M(A) = {}^{(\mathbf{w})}\!\!\int_A m(x)\lambda \mathrm{d}x \qquad \big(A \in \mathcal{A}\big) . \quad \square$$

Ha $M : \mathcal{A} \to \mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H})$, vagyis az értékkészlet pozitív, akkor a feltételt elég $M(A) > 0 \Rightarrow \lambda(A) > 0$ formában megkövetelni, az integrál erősen is konvergens és $m(x) \ge 0$. OProM esetében persze ez a helyzet.

Amennyiben a spektrum diszkrét, akkor λ-t a spektrumra koncentrált számlálómértéknek választva $M \ll \lambda$ nyilván teljesül. Folytonos spektrumnál a gyakorlati alkalmazások túlnyomó többségében a Lebesgue-mérték megfelelő domináns mérték. Így nem vesztünk sokat azzal, ha szükség esetén $M(\mathrm{d}x) = m(x)\lambda(\mathrm{d}x)$ alakot feltételezünk.

1.11. Állítás. *Az $E_1(\mathrm{d}x_1) = e_1(x_1)\lambda_1(\mathrm{d}x_1)$ és $E_2(\mathrm{d}x_2) = e_2(x_2)\lambda(\mathrm{d}x_2)$ PProM-ok pontosan akkor felcserélhetőek, ha $\lambda_1 \times \lambda_2$-mm. (x_1, x_2) esetén e_1 és e_2 azok.* $\square$

1.2. Állapot a mérés után. Kvantum–„műszerek”

Egy kvantumrendszeren végzett fizikai mérés eredménye nem kizárólag a mért eredmény – egyben valamilyen, jellemzően sztochasztikus és a mért eredménnyel esetleg összefüggésben lévő változás is végbemegy magában a mért rendszerben. Egy mérés teljes leírása magába kell hát foglalja az x kimenetel S kiinduló-állapothoz rendelt eloszlása mellett a rendszer új állapotát is, ha a kezdeti állapot S és a mért érték x. $\mathcal{M}$-mel fogunk jelölni egy olyan leképezést, amely a kezdeti állapotokhoz a fenti adatokat rendeli. [BNGJ03][13] elnevezését követve ezen leképezéseket – ha kifejezetten meg akarjuk őket különböztetni más, a végső állapot leírását nem tartalmazó mérésektől – *kvantum-műszereknek* hívjuk. A kvantummechanika posztulált szabályai szerint egy ilyen leképezés nem lehet tetszőleges, eleget kell tegyen bizonyos feltételeknek, melyekre mindjárt kitérünk.

> Fontos megemlítenünk, hogy a „mérés eredménye” megfogalmazás még annyira sem egyértelmű, mint amennyire annak látszik. A mérést valamilyen kölcsönhatásként szeretnénk elképzelni a megfigyelés tárgyát képező kvantum-rendszer, valamint a mérőberendezést és a kísérletezőt is magába foglaló külvilág között. A mérés után a kísérletező birtokában lévő információ minden bizonnyal csak töredékét fejezi ki mindannak a változásnak, melyet a kölcsönhatás a külvilágban okozott. A világ mérés utáni állapota és a kísérletező számára erről elérhető adat közti különbséggel nem kell törődnünk mindaddig, amíg csak a mérés leolvasott eredményének statisztikai tulajdonságait vizsgáljuk; a mérés utáni állapotnál viszont fontos, hogy pontosan mit veszünk bele a feltételbe. Ezért kiemeljük, hogy a mérés kimenetele alatt mindig a kísérletező számára rendelkezésre álló eredményt értjük, a mérés utáni állapotnál pedig csakis ezen információt vonjuk bele a feltételbe.[14]

Tekintsünk most egy $\mathcal{M}$ mérést, melynek x kimenetelei az $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$ mérhető tér elemeiből kerülhetnek ki. Jelölje továbbra is $\mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x)$ a kimenetel eloszlását, ha a kezdeti állapot S és $\sigma_{\mathcal{M}}(x; S)$ a végső állapotot, ha a kezdeti állapot S és az eredmény x. Legyen továbbá Y egy obszervábilis és $A \in \mathcal{A}$ kimenetelek egy mérhető halmaza. Képzeljük el, hogy az $\mathcal{M}$ mérés végrehajtása után kizárólag annyit jegyzünk fel, hogy az eredmény A-beli lett-e, majd a rendszeren elvégezzük az Y által leírt mérést. A végső eredmény legyen az Y mérés eredménye, ha $x \in A$-t jegyeztünk fel és 0 egyébként. Ezen mérés várható értéke

$$\int_A \mathrm{Tr}\big(\sigma_{\mathcal{M}}(x; S) Y\big) \mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x) \ .$$

Látni fogjuk, hogy S, A, Y függvényeként tekintve a fenti kifejezés egyértelműen meg is határozza $\mathcal{M}$-et. Mivel a kezdeti állapotban alkalmazott klasszikus keverés a kimeneteli eloszlás azonos keverését eredményezi, $S \mapsto (\dots)$ affin, következésképp felírható $S \mapsto \mathrm{Tr}\big(S\mathcal{M}_{[A]}(Y)\big)$ alakban, ahol $\mathcal{M}_{[A]}(Y)$ minden $Y \in \mathbb{SA}(\mathcal{H})$ obszervábilis és $A \in \mathcal{A}$ esetén egyértelműen definiált (esetleg nem-korlátos) önadjungált operátor $\mathcal{H}$-n. Ezen $\mathcal{M}_{[A]}(Y)$ σ-additív kell legyen A-ban, pozitív és lineáris Y-ban és normalizált abban az értelemben, hogy $\mathcal{M}_{[\mathcal{X}]}(\mathbf{1}) = \mathbf{1}$.[15]

Sőt, a pozitivitás helyett teljes pozitivitást követelünk meg az $Y \mapsto \mathcal{M}_{[A]}(Y)$ leképezéstől. Úgy is fogalmazhatunk, hogy $\mathcal{M}_{[\cdot]}$ egy $\mathcal{H}$ feletti teljesen pozitív szuperoperátor értékű mérték.

[13] pontosabban az általuk hivatkozott két cikk

[14] Lényegében valamilyen feltételes eloszlásra gondolunk azzal a kiegészítéssel, hogy egy kvantumállapotokon értelmezett valószínűségi eloszlás helyett mindig a megfelelő keveréssel kapott egyetlen állapotot (ha úgy tetszik, a feltételes várható értéket) tekintjük. Fontos azonban, hogy nem valamilyen együttes eloszlásból származtatjuk a feltételes állapotot, hanem minden egyes $X = x$ feltételhez „közvetlenül” adjuk meg azt.

[15] Ezek közül csak a pozitivitás nem adódik közvetlenül a formális felírásból – lényegében ez fejezi ki, hogy bármit jegyzünk is fel a mérés eredményéről, a mérés utáni állapotot is $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ eleme.

$\mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H}) \subset \mathbb{SA}(\mathcal{H})$ azzal a feltétellel is kijelölhető, hogy $\forall S \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}) : \ \operatorname{Tr} S(\,\cdot\,) \geq 0$. Nemnegatív Y obszervábilisre a fenti integrál értéke nyilvánvalóan nemnegatív lesz, azaz $\forall S \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}) : \operatorname{Tr} S\mathcal{M}_{[A]}(Y) \geq 0$, $\mathcal{M}_{[A]}(Y) \in \mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H})$. Azaz a kvantum-műszer pozitivitása annyit tesz, hogy a rendszeren értelmezett pozitív obszervábilisek pozitívak maradnak akkor is, ha a rendszeren végrehajtjuk az $\mathcal{M}$ mérést. A pozitív obszervábiliseket tekintve „elsődlegesnek", a fenti feltételhez hasonló

$$S \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}) \Leftrightarrow \left\{\operatorname{Tr} S = 1 \ \wedge \ \forall Y \in \mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H}) \colon \operatorname{Tr} SY \geq 0\right\}$$

jellemzését adhatjuk a sűrűség-operátoroknak. Ebben a megközelítésben a pozitivitás azt fejezi ki számunkra, hogy a mérés fizikailag értelmes állapotból indulva fizikailag értelmes állapotot eredményez.

Eddig az $\mathcal{M}$ műszert úgy tekintettük, hogy az a $\mathcal{H}$ Hilbert-térrel leírt rendszeren hat. Megtehetnénk azonban, hogy veszünk egy másik, teljesen tetszőleges rendszert – melyhez a $\mathcal{K}$ Hilbert-tér tartozik – és a mérés hatását az egész rendszeren tekintjük, melyet $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ segítségével írunk le. Ha a két részrendszer „független" – az egész rendszer valamilyen $S \otimes \widetilde{S}$ szorzatállapotban van –, akkor elvárjuk, hogy $\mathcal{M}$ a második komponenst változatlanul hagyja és az elsőn úgy hasson, ahogy eddig is tette, mielőtt $\mathcal{K}$ szóba került volna. Mindebbe természetesen beleértjük, hogy a végső állapot is szorzatállapot marad. Mivel a szorzatállapotokon előírtuk $\mathcal{M}$ hatását, a linearitás segítségével tetszőleges állapotban is egyértelműen kiszámítható. $\mathcal{M}$-től elvárjuk, hogy az egész rendszerre ily módon kiterjesztett változata is pozitív legyen, ami – iménti második értelmezésünk szerint – annyit jelent, hogy ha a mérés tárgyát képező rendszer esetleg csatolt állapotban van egy másik rendszerrel, akkor is teljesüljön, hogy a teljes rendszer bármely fizikailag értelmes állapotához és a mérés bármely lehetséges ($\pi_{\mathcal{M}}(A; S) > 0$) eredményéhez a végső állapot is fizikailag értelmes legyen.

Az intuitív értelmezés mellett megadjuk a teljes pozitivitás precíz definícióját is:

1.12. Definíció. Az $\mathcal{H}$ Hilbert-tér obszervábilisein a $\mathcal{M}_{[A]}(Y)$ leképezéssel adott műszer *teljesen pozitív*, ha tetszőleges $\mathcal{K}$ Hilbert-térre a $\widetilde{\mathcal{M}}_{[A]}(Y \otimes Z) \triangleq \mathcal{M}_{[A]}(Y) \otimes Z \quad \big(Z \in \mathbb{SA}(\mathcal{K})\big)$ képlettel és a linearitási feltétellel definiált $\widetilde{\mathcal{M}}$ műszer is pozitív.[16]

Egy mérés matematikai leírását tehát egyaránt megadhatjuk a $\mathbf{P}, \sigma$ párral – amely a mérési eredmény eloszlását és a mérés utáni állapotot veszi alapul –, vagy az $\mathcal{M}_{[A]}(Y)$ operátorokkal. Azért fogjuk a második módszert preferálni – bár itt az addititivitást, affinitást, linearitást és pozitivitást vizsgálni kell, míg a másik megközelítésben automatikusan adódnak –, mert a teljes pozitivitást csak $\mathcal{M}_{[A]}(Y)$ segítségével tudjuk megragadni.

1.13. Állítás. *Az $A \mapsto \mathcal{M}_{[A]}(Y) \quad \big(A \in \mathcal{A},\ Y \in \mathbb{SA}(\mathcal{H})\big)$ leképezés egyértelműen meghatározza a $\mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x)$ eloszlást és a $\sigma_{\mathcal{M}}(x; S) \quad \big(S \in \mathfrak{S}(\mathcal{H})\big)$ mérés utáni állapotot.*

Az [Oza85] által közölt bizonyítás gondolatmenetét tekintjük át. Először az $\mathcal{M}$ méréshez tartozó OProM-ot határozzuk meg: ez nem más, mint

$$M(A) = \mathcal{M}_{[A]}(\mathbf{1}) \ .$$

Ezek után a mérési eredmény eloszlása

$$\mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(A) = \operatorname{Tr} SM(A) = \operatorname{Tr} S\mathcal{M}_{[A]}(\mathbf{1}) \ .$$

Ha a kezdeti állapot S és ehhez $A \in \mathcal{A}$ pozitív valószínűségű ($\operatorname{Tr} S\mathcal{M}_{[A]}(\mathbf{1}) \geq 0$), akkor A-beli mérési eredményt feltéve a mérés utáni állapot az alábbi egyenletrendszer $\sigma_{\mathcal{M}}(A; S)$ megoldása:

[16] A teljes pozitivitás kapcsán lásd még az A.1.2 függeléket.

$$\operatorname{Tr}\sigma_{\mathcal{M}}(A;S)Y = \frac{\operatorname{Tr} S\mathcal{M}_{[A]}(Y)}{\operatorname{Tr} S\mathcal{M}_{[A]}(\mathbf{1})} \qquad \big(Y \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\big)\ .$$

Végül a mérés utáni állapotokat a következő tulajdonság határozza meg ($\mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}$-mm. egyértelműen):

$$\operatorname{Tr} S\mathcal{M}_{[A]}(Y) = \operatorname{Tr}\sigma_{\mathcal{M}}(A;S)Y = \int_A \operatorname{Tr}\sigma_{\mathcal{M}}(x;S)\cdot \mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x) \qquad \big(Y \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}),\ A \in \mathcal{A}\big)\ .$$

Formálisan:

$$\operatorname{Tr}\sigma_{\mathcal{M}}(x;S)Y = \frac{\operatorname{Tr} S\mathcal{M}_{[\mathrm{d}x]}(Y)}{\mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x)} \qquad \big(Y \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\big)\ .$$

A felírt egyenletek (lényegében) egyértelmű megoldhatóságát nem részletezzük. □

1.14. Definíció. Egy kvantum-műszer *Kraus-reprezentációja* alatt – ha létezik –

$$\mathcal{M}_{[\mathrm{d}x]}(Y) = \sum_j W_j^*(x)YW_j(x)\lambda(\mathrm{d}x) \tag{1.4}$$

alakú felírást értünk, ahol $\lambda \sum \sigma$-véges mérték $\mathcal{X}$ felett[17], az összeg megszámlálható tagú és $W_j : \mathcal{X} \to \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ mérhető függvények olyan családja, melyre

$$\sum_j \int_{\mathcal{X}} W_j(x)W_j^*(x)\lambda(\mathrm{d}x) = \mathbf{1}\ .$$

Ebben az esetben

$$\sigma_{\mathcal{M}}(x;S) = \frac{\sum_j W_j^*(x)SW_j(x)}{\sum_j \operatorname{Tr}\big[SW_j(x)W_j^*(x)\big]}\ ;$$

$$\mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x)) = \sum_j \operatorname{Tr}\big[SW_j(x)W_j^*(x)\big]\,\lambda(\mathrm{d}x)\ .$$

Végtelen dimenziós Hilbert-terek esetében *nem-korlátos kvantum-műszereket* is megengedhetünk, azaz eltekinthetünk $\mathcal{M}_{[A]}(Y)$ végességétől. Ekkor persze $W_j(x)$ sem lesz feltétlenül korlátos és a mérés utáni állapot esetleg nem definiált tetszőleges x eredményhez, csak pozitív mértékű A halmazokhoz.[18]

[BNGJ03] – nem bizonyított és nem hivatkozott – megjegyzése szerint a teljes pozitivitást kikötve minden kvantum-műszer felírható Kraus-reprezentáció formájában.

1.15. Definíció. A $Q = \sum xE_{[x]}$ spektrálfelbontású egyszerű obszervábilishez tartozó *egyszerű kvantum-műszer* az, amelynél a mérési eredmény eloszlása $\mathbf{P}(X = x) = \operatorname{Tr} SE_{[x]}$ és $\sigma_{\mathcal{M}}(x;S) = \big(E_{[x]}SE_{[x]}\big)/\operatorname{Tr}\big(E_{[x]}S\big)$. Úgy is fogalmazhatunk, hogy a műszerre teljesül a *Neumann-féle projekciós posztulátum*.

1.16. Megjegyzés. *Neumann-féle műszer esetén könnyen előállíthatunk megfelelő Kraus-reprezentációt. Legyen λ a spektrumra koncentrált számlálómérték, az egyetlen W_j pedig $W(x) = \chi_{\operatorname{Sp} Q}(x)\cdot E_{[x]}$.*

[Oza85] általánosítja a mérésekre kimondott realizációs tételt (1.9). Eszerint tetszőleges teljesen pozitív kvantum-műszer megvalósítható úgy, hogy valamilyen kiegészítő rendszert (tenzorszorzat) adott ideig kölcsönhatásba hozunk vele (Schrödinger-egyenlet szerinti időfejlődés), majd az egész rendszerre egy egyszerű kvantum-műszert hattatunk.

[17] bátran feltehetjük, hogy valószínűségi mérték

[18] Emellett az összegek, integrálok értelmezése is több figyelmet igényel, ha egyes elemek nem feltétlenül korlátosak. Ezekre a problémákra most nem térünk ki.

Miként obszervábilisekre, úgy kvantum-műszerekre is definiálhatjuk a finomítás és elmosás (coarsening) fogalmát, valamint a szorzatrendszereken végzett méréseket. Ezen felül módunk van a kvantum-műszereket *komponálni* is, hiszen rendelkezésünkre áll a mérés utáni állapot leírása. A kompozíció kimenetelei a két eredménytér direkt szorzataként adódnak, a mérés utáni állapot felírása pedig csak papírt és tintát igényel… Sőt, olyan összetett mérést is definiálhatunk, ahol a másodszorra használt műszert az első mérési eredmény (mérhető) függvényeként határozzuk meg.

Az elmosást konkrétan felírjuk, egy formula megadása végett. Legyen $\mathcal{M} : \mathcal{H} \rightsquigarrow (\mathcal{X}, \mathcal{A})$ kvantum-műszer és $\mathcal{M}'$ ennek elmosása, azaz $\mathcal{M}' : \mathcal{H} \rightsquigarrow (\mathcal{Y}, \mathcal{B})$ alkalmas $T : (\mathcal{X}, \mathcal{A}) \to (\mathcal{Y}, \mathcal{B})$ leképezésre álljon elő $\mathcal{M}'_{[B]}(\,\cdot\,) = \mathcal{M}_{[T^{-1}(B)]}(\,\cdot\,) \quad \big(B \in \mathcal{B}\big)$ alakban. (Azaz a mérés x eredménye helyett csak a $T(x)$ statisztikát olvassuk le.) Ekkor a mérés utáni állapotokra

$$\sigma_{\mathcal{M}'}(t; S) = \int_{T^{-1}(t)} \sigma_{\mathcal{M}}(x; S) \mathbf{P}_S^{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x|t) \ , \tag{1.5}$$

ahol $\pi_{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x|t; S)$ a $\pi_{\mathcal{M}}(\mathrm{d}x; S)$ eloszlásból számított, T szerinti feltételes eloszlás sűrűségfüggvénye.

Egy összetett rendszer egy komponensén ható műszer természetes módon kiterjeszthető az egész rendszerre hatóvá. Az ellenkező irány érdekesebb: az összetett rendszert mérő műszer mikor valósítható meg úgy, hogy csak a részrendszereken külön-külön, szeparáltan ható műszereket használunk. Ezt a kérdést formálisan többféleképpen is megfogalmazhatjuk.

1.17. Definíció. *Szeparálható* egy műszer, ha a Kraus-reprezentáció felírható úgy, hogy minden egyes $W_i(x)$ tenzorszorzat alakú.

1.18. Definíció. *Multilokális* egy műszer, ha előállítható a következő módon:

- veszünk olyan méréseket, melyek mindegyike csak egy-egy részrendszeren hat;
- ezeket komponáljuk, megengedve, hogy akár a műszer, akár a mérendő komponens választása függjön a korábbi mérések eredményeitől (egy-egy rendszert többször is megmérhetünk);
- az így kapott műszer helyett annak egy elmosott változatára térünk át.

[BDF+99] tétele szerint minden multilokális műszer szeparálható, de nem minden szeparálható műszer multilokális. Azaz sajnálatos módon a multilokalitás inkább fizikai és a szeparálhatóság inkább matematikai indíttatású fogalma nem esik egybe.[19]

1.3. Klasszikus vs. kvantum-statisztika. Műszerek kompatibilitása

Az állapot, mérés és műszer fogalmának birtokában áttekinthetjük, hogyan alakul a statisztikai következtetés alapmodellje, ha a klasszikus esetről a kvantumosra térünk át. Érdemes kiemelni azt az egyszerűbb esetet, amikor a műszer valós értékű és eleget tesz a projekciós posztulátumnak.

[19] Az itt multilokálisnak, illetve szeparálhatónak nevezett műszerekre sokan a szeparálható, illetve nem-csatolt (unentangled) jelzőket használják. Ez tovább bővíti azon fogalmak körét, melyek közt kérdéses, mi mivel esik egybe…

klasszikus	kvantum	Neumann-féle mérés
$\{\mathbf{Q}_\vartheta(\,\cdot\,)\,\vert\vartheta\in\Theta\}$ eloszláscsalád a $\mathcal{Z}$ mérhető téren	$\{\boldsymbol{S}_\vartheta\vert\vartheta\in\Theta\}$ állapot-család $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$-ban	$\{\boldsymbol{S}_\vartheta\vert\vartheta\in\Theta\}$ állapot-család $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$-ban
$T:\mathcal{Z}\to(\mathcal{X},\mathcal{A})$ statisztika	$\mathcal{M}:\mathcal{H}\rightsquigarrow(\mathcal{X},\mathcal{A})$ műszer	$E:\mathcal{A}\to\mathbb{SA}(\mathcal{H})$ PProM, $Q=\int xE(\mathrm{d}x)$ obszervábilis
a mérési eredmény eloszlása: $\forall A\in\mathcal{A}$ $\mathbf{P}_\vartheta(A)=\mathbf{Q}_\vartheta\circ T^{-1}(A)$	$M(A)=\mathcal{M}_A(\mathbf{1}_\mathcal{H})$ jelöléssel $\mathbf{P}_\vartheta^\mathcal{M}(A)=\mathrm{Tr}\,(S_\vartheta M(A))$	$\mathbf{P}_\vartheta^E(A)=\mathrm{Tr}\,\big(S_\vartheta E_{[A]}\big)$
feltételes eloszlás,[20] ha $T\in A$: $\mathbf{Q}_\vartheta(\,\cdot\,\vert T\in A)$, melyet $\forall f:\mathcal{Z}\to\mathbb{R}$: $\int_\mathcal{Z} f\,\mathrm{d}\mathbf{Q}=\frac{\int f\cdot\chi_{\bar{A}}\mathrm{d}\mathbf{Q}_\vartheta}{\int\chi_{\bar{A}}\mathrm{d}\mathbf{Q}_\vartheta}$ szab meg $\big(\bar{A}\triangleq T^{-1}(A)\big)$.	mérés utáni állapot, ha $T\in A$: $\sigma_\mathcal{M}(A;\vartheta)$, melyet $\forall Y\in\mathfrak{B}(\mathcal{H})$: $\mathrm{Tr}\,\sigma Y=\frac{\mathrm{Tr}\,S_\vartheta\mathcal{M}_A(Y)}{\mathrm{Tr}\,S_\vartheta\mathcal{M}_A(\mathbf{1}_\mathcal{H})}$ ad meg.	mérés utáni állapot, ha $T\in A$: $\sigma_E(A;\vartheta)=\frac{E_{[A]}S_\vartheta E_{[A]}}{\mathrm{Tr}\,S_\vartheta E_{[A]}}$

Egy fontos eltérést ragadhatunk meg a klasszikus és kvantum-statisztika között, mely több későbbi fogalomnál – pl. teljesség, elégségesség – is megjelenik.

Tekintsünk egy $\{\mathbf{P}_\vartheta\}$ paraméterezett (klasszikus) eloszláscsaládot, melyen a T és U statisztikákat tudjuk vizsgálni. T megmérése után nyerünk egy $T\in A$ jellegű információt (például $T=t$). Ha emellett U-t is használni akarjuk a statisztikai következtetéshez, ezt akár úgy is megtehetjük, hogy tekintjük a $\{\mathbf{P}_\vartheta(\,\cdot\,\vert T\in A)\}$ feltételes eloszláscsaládot és U ezen családhoz tartozó eloszlásaiból alkotjuk meg a következtetés modelljét az U által szolgáltatott információ – és a $T\in A$ ismeret – felhasználására.[21] Semmi sem kényszerít azonban, hogy így tegyünk: ekvivalens modellt kapunk, ha (T,U) együttes eloszlását elemezzük az eredeti családban, vagy akár az $U\in B$-hez tartozó feltételes eloszláscsaládban vizsgáljuk T viselkedését. Értelmezésünk szerint tehát csak kényelmi – a számításokat egyszerűbbé tevő – szerepe lehet annak, hogy a két mérést milyen sorrendben végezzük el egymás után, következésképp úgy is tekinthetjük, hogy „egyszerre” kerül rájuk sor.

Kvantumos modellben a fentiek megfelelőjében egy $\{\boldsymbol{S}_\vartheta\}\subset\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ állapot-család és $\mathcal{M}:\mathcal{H}\rightsquigarrow\mathcal{X}$, $\mathcal{N}:\mathcal{H}\rightsquigarrow\mathcal{Y}$ műszer-pár szerepel. Az $\mathcal{M}$ mérés elvégzését elhatározva egy $\mathcal{X}$ feletti $\mathbf{P}_\vartheta^\mathcal{M}$ klasszikus statisztikai modellt kapunk a mérési eredényre, valamint $x\in A$ esetében egy $\sigma_\mathcal{M}(A;\vartheta)$ posterior állapotcsaládot. Ha ezek után alkalmazni akarjuk az $\mathcal{N}$ műszert is a rendszerre, azt *csakis* a posterior állapotra tehetjük meg. Természetesen vizsgálhatjuk a két kimenet alkotta $(x,y)\in\mathcal{X}\times\mathcal{Y}$ pár eloszlásának alakulását ϑ függvényében, de ez nem feltétlenül – sőt, tipikusan nem – lesz azonos azzal, melyet a két mérés sorrendjének megfordításával kapnánk. Ilyen esetben aligha van értelme arról beszélni, hogy a két mennyiséget megmérve milyen eredményt kapunk.

1.19. Definíció (kompatibilitás). Az $\mathcal{M}^{(i)}$ műszereket *kompatibilisnek* – avagy gyakran: együtt/egyszerre alkalmazhatónak – nevezzük, ha a kompozíciójukként adódó műszer független a sorrendtől. Az M_i méréseket kompatibilisek, ha mint OProM-ok felcserélhetőek.

[20] $\mathbf{Q}_\vartheta$-nullmértékű $T^{-1}(A)$ esetén mindenféle nehézségek merülnek fel – nem akarunk nullával osztani –, ekkor a feltételes eloszlás reguláris változatára van szükségünk, amely lényegében egyértelmű, de nem éppen könnyen kezelhető. Ezt most kihagyjuk.

[21] Például ismeretlen eltolás- és skálaparaméterű $N(\mu,\sigma^2)$ normális családból származó $(X_i)_{i=1}^n$ i.i.d. minta alapján μ intervallumbecsléséhez T-t érdemes a korrigált tapasztalati szórásnégyzetnek választani, mert ekkor a feltételes eloszlások családjában $\big(\bar{X},(X_i-\bar{X})_{i=2}^n\big)$ függetlenek, továbbá csak $\bar{X}\sim N(\mu,T/n)$ eloszlása függ μ-től. Az $U=\bar{X}$ statisztika viselkedése tehát jóval egyszerűbb a feltételes modellben.

1.20. Megjegyzés. Neumann-féle műszerek pontosan akkor kompatibilisek mint műszerek, ha kompatibilisek mint mérések.

Műszerekre a kompatibilitásnak nyilván szükséges feltétele, hogy az $\mathcal{M}^{(i)}_{[(\,\cdot\,)_i]}$ szuperoperátor értékű mértékek felcserélhetőek legyenek.

A felcserélési relációk – melyekről a 4.2.2 pontban lesz még szó – eszerint az együtt-nem-mérhetőség szélsőséges esetét jelentik. Ennek megfelelően a határozatlansági relációk értelmezésénél gyakran használt „az állapotban a két mennyiséget megmérve, ha az egyik pontosan mérhető, akkor a másik erősen szóródik” megfogalmazás legalábbis problémás. A helyes megfogalmazás azokat a szórásokat kapcsolja össze, melyek akkor adódnának, ha a mérések valamelyikét elvégeznénk. Statisztikai értelemben arról van szó, hogy ha a rendszer sok példányát tudjuk ebben az állapotban preparálni, és mindkét kérdéses mennyiséget a sokaság viszonylag nagy hányadán elvégezzük, akkor az egyik és a másik mérés szóródása a megfelelő reláció szerint fog viselkedni.

A (2.13) képletben adunk meg egy olyan határozatlansági relációt, amely egyetlen, többdimenziós értékű mérés marginálisaira is alkalmazható.

2. Az operátor-formalizmus

2.1. Nyomoperátorok és Hilbert-Schmidt operátorok

Tekintsünk a $\mathcal{H}$ Hilbert-teret és abban egy rögzített $\{e_j\}$ ortonormált bázist. Legyen X olyan korlátos operátor, amely ebben diagonális, azaz

$$X = {}^{(\mathrm{s})}\sum_j x_j |e_j\rangle \langle e_j| \ .$$

A sajátértékek x_j sorozata tulajdonságainak megfeleltethetjük az X operátor tulajdonságait. Pl.

$$\|X\| = \sup_j \|x_j\| \ ;$$

X pontosan akkor önadjungált (pozitív), ha minden x_j valós (nemnegatív) stb.

Ennek örömére érdemes lehet definiálni a nevezetes sorozatosztályok operátor-megfelelőit. A korlátos sorozatok $\mathfrak{c}$ terének a sup-normával a korlátos diagonális operátorok felelnek meg az operátor-normával. A véges tartójú sorozatok a véges rangú diagonális operátoroknak felelnek meg. Teljessé tétele – a nullsorozatok tere – a kompakt diagonális operátoroknak felel meg.

Az $\mathfrak{l}^1$ és $\mathfrak{l}^2$ terek normái a következő normákhoz vezetnek:

$$\|X\|_1 = \sum_j |x_j| = \mathrm{Tr}\,|X| \qquad \left(\text{itt } |X| \triangleq \sqrt{X^*X} = \textstyle\sum_j |x_j| \cdot |e_j\rangle \langle e_j|\right) ,$$

$$\|X\|_2 = \sqrt{\textstyle\sum_j |x_j|^2} = \sqrt{\mathrm{Tr}\, X^*X} \ .$$

Az érdekes témakör persze a megfelelő operátorterek megkeresése úgy, hogy nem csak egyidejűleg diagonalizálható operátorokkal foglalkozunk – azaz a nemkommutatív eset.

A véges rangú operátorok $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$ teréből fogunk kiindulni, azt téve teljessé a megfelelő normákra nézve. Operátor-normával vett lezártja a kompakt operátorok halmaza, mellyel most nem foglalkozunk többet. Pusztán annyit jegyzünk meg, hogy minden kompakt önadjungált operátornak létezik $X = {}^{(\mathrm{u})}\sum_j x_j \cdot |e_j\rangle \langle e_j|$ spektrálfelbontása, ahol $\{e_j\}$ sajátvektorok alkotta ortonormált bázisa $\mathcal{H}$-nak. Lássuk most az $\mathfrak{l}^1$ megfelelőjét!

Tetszőleges X önadjungált operátorra definiálhatjuk annak $|X| = \int |\lambda|\, E(\mathrm{d}\lambda)$ abszolútértékét a spektrálmérték segítségével. Korlátos X-re legyen

$$|X| = \sqrt{X^*X} \ ;$$

itt X^*X pozitív önadjungált, így a spektrálmérték szerinti integrállal bármely folytonos függvénye egy jóldefiniált önadjungált operátor, mely jelen esetben pozitív is. Minthogy $|X|^* |X| = |X|^2 = X^*X$, tetszőleges $\psi \in \mathcal{H}$-ra

$$\big\||X|\,\psi\big\| = \|X\psi\| \ .$$

Tekintve, hogy önadjungált $T \in \mathfrak{F}(\mathcal{H})$ esetén $|T| \in \mathfrak{F}(\mathcal{H})$, legyen

$$\|T\|_1 = \mathrm{Tr}\,|T| \ .$$

Ekkor tetszőleges T, X véges rangú operátorokra

$$|\mathrm{Tr}\, TX| \le \|T\|_1 \cdot \|X\| \ .$$

Ugyanis $|T|$ véges rangú önadjungált, így választható sajátvektoraiból e_j ortonormált bázis. Ezzel $\|Te_j\| = \big\||T|\,e_j\big\| = \big\langle e_j \big|\, |T|\, e_j \big\rangle$, így hát

$$|\mathrm{Tr}\, TX| = \Big|\sum_j \langle X^* e_j | Te_j \rangle\Big| \leq \|X^*\| \cdot \sum_j \|Te_j\| = \|X\| \cdot \|T\|_1 \ .$$

Ha most X-et a T véges rangú operátor $T = \sum_j |\phi_j\rangle \langle\psi_j|$ reprezentációjához a $\{\phi_j, \psi_j\}$ által generált véges dimenziós altér E projektorának választjuk, akkor $TE = T$ és $\|E\| = 1$, azaz

$$|\mathrm{Tr}\, T| \leq \|T\|_1 \ .$$

Ez arra utal, hogy a nyom értelmezésének természetes tartománya $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$ lezárása a $\|\cdot\|_1$ normára nézve. A bizonyítás mellőzésével citáljuk a megfelelő eredményt.

2.1. Tétel. *A $\|T\|_1 = \mathrm{Tr}\,|T|$ képlet normát definiál $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$-n, melyet ezen normára teljessé téve a kapott $\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})$ Banach-tér elemeire – melyeket nyomoperátoroknak nevezzük – fennáll $\|T\|_1 = \mathrm{Tr}\,|T| < \infty$. A nyom egyértelmű folytonos kiterjesztését $\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})$-ra az alábbi képlet adja:*

$$\mathrm{Tr}\, T = \sum_j \langle e_j | Te_j \rangle \ ,$$

ahol $\{e_j\}$ tetszőleges ortonormált bázis, melynek választása nem befolyásolja a kifejezés értékét.

Minthogy $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$-n nyilván $\|\cdot\| \leq \|\cdot\|_1$, az utóbbi normára való lezárás szűkebb, azaz minden nyomoperátor kompakt. Következésképp minden önadjungált nyomoperátornak van

$$T = {}^{(\mathrm{u})}\!\sum_j t_j \cdot |e_j\rangle \langle e_j|$$

spektrálfelbontása, ahol az összeg még a $\|\cdot\|_1$ norma szerint is konvergens, hiszen $\big\||e_j\rangle \langle e_j|\big\|_1 = 1$ és $\sum_j |t_j| = \mathrm{Tr}\,|T| < \infty$. Végül $\mathrm{Tr}\, T = \sum_j t_j$.

Legyen

$$T_+ = \sum_{t_j > 0} t_j |e_j\rangle \langle e_j| \ , \quad T_- = \sum_{t_j < 0} -t_j |e_j\rangle \langle e_j| \ ,$$

ezzel $T = T_+ - T_-$, $|T| = T_+ + T_-$, következésképp

$$\|T\|_1 = \mathrm{Tr}\, T_+ + \mathrm{Tr}\, T_- = \|T_+\|_1 + \|T_-\|_1 \ .$$

Minden véges nyomú pozitív operátor nyomoperátor, tehát spektrálfelbontása $\|\cdot\|_1$ szerint is konvergens; továbbá abban minden t_j sajátérték nemnegatív. Speciálisan minden sűrűség-operátor előáll

$$S = \sum_j s_j |\psi_j\rangle \langle\psi_j| \qquad\qquad \big(s_j \geq 0,\ \textstyle\sum_j s_j = 1,\ \|\psi_j\| = 1\big)$$

alakban.

Tudjuk, hogy az $\mathfrak{l}^1$ folytonos lineáris funkcionáljainak tere $\mathfrak{c}$. A következő tétel ennek nemkommutatív megfelelője. (A $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$ Banach teret az operátor normával tekintjük.)

2.2. Tétel. *Ha T nyomoperátor és X korlátos, akkor TX és XT egyaránt nyomoperátorok, valamint*

$$\operatorname{Tr} T^* = \overline{\operatorname{Tr} T}\,, \qquad \operatorname{Tr} TX = \operatorname{Tr} XT\,,$$
$$|\operatorname{Tr} TX| \le \|T\|_1 \cdot \|X\|\ . \tag{2.1}$$

Bármely $X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ esetén a

$$\mathfrak{T}^1(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}\,, \quad T \mapsto \operatorname{Tr} TX$$

képlet folytonos lineáris leképezést ad $\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})$-n, melynek normája éppen $\|X\|$. Végül: minden $\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})$-n ható folytonos lineáris leképezés ilyen alakú.

A bizonyítást ld. [Hol82, 77–79. o.]. □

Érdemes megjegyezni, hogy e tétel értelmében kommutátor nyoma mindig 0 – látni fogjuk, hogy ez a kommutátor későbbi, kiterjesztett értelmezéseinél is igaz marad.

Tehát $[\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})]^* = \mathfrak{B}(\mathcal{H})$. Az önadjungált operátorok megfelelő valós Banach-tereit $\mathbb{R}$ indexszel jelölve $\left[\mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})\right]^* = \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$ is igaz. Sőt, a képlet által adott leképezés pontosan akkor pozitív, ha X az. Következésképp

$$\operatorname{Tr} TX \le \operatorname{Tr} TY \qquad \big(T \in \mathfrak{T}^1(\mathcal{H}),\, T \ge 0;\ X, Y \in \mathfrak{B}(\mathcal{H}),\, X \le Y\big)\ . \tag{2.2}$$

Felírhatunk egy hasznos összefüggést. Legyen f korlátos, mérhető (valós) függvény, X önadjungált operátor $E(\mathrm{d}x)$ spektrálmértékkel, $S = \sum_j s_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ sűrűségi operátor, $\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) = \operatorname{Tr} SE(\mathrm{d}x)$. Ekkor

$$\int f(x)\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) = \operatorname{Tr} Sf(X)\,, \tag{2.3}$$

ugyanis S spekrálfelbontása szerint kifejtve a $\operatorname{Tr} SE(\mathrm{d}x)$ nyomot $\operatorname{Tr} SE(A) = \sum_j s_j \langle\psi_j|E(A)|\psi_j\rangle$, így

$$\int f(x)\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) = \sum_j s_j \int f(x)\langle\psi_j|E(\mathrm{d}x)|\psi_j\rangle = \sum_j s_j \langle\psi_j|f(X)|\psi_j\rangle = \operatorname{Tr} Sf(X)\,,$$

az integrálás és az összegzés sorrendje f korlátossága miatt volt felcserélhető. Ebben az esetben tehát a $\operatorname{Tr} SI \overset{!}{\equiv} \int f(x) \operatorname{Tr} SE(\mathrm{d}x)$ előírással definiált $I = \int f(x)E(\mathrm{d}x)$ integrál egyszerűen $f(X)$.

Térjünk most át az $\mathfrak{l}^2$ tér nemkommutatív megfelelőjére. Vezessük be $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$-n a következő belső szorzást és normát:

$$(T_1|T_2) = \operatorname{Tr} T_1^* T_2\,, \qquad \|T\|_2 = \sqrt{\operatorname{Tr} T^*T}\,.$$

2.3. Tétel. *Az $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$ tér teljessé tétele a fenti normára a $\mathfrak{T}^2(\mathcal{H})$ Hilbert-tér. Ennek elemei – az ún. Hilbert–Schmidt operátorok – azon T korlátos operátorok, melyekre $\operatorname{Tr} T^*T \equiv \sum_j \|Te_j\|^2 < \infty$ valamely (bármely) $\mathcal{H}$-beli $\{e_j\}$ ortonormált bázisra. Tetszőleges $T_1, T_2 \in \mathfrak{T}^2(\mathcal{H})$ operátorokra $T_1 \cdot T_2$ nyomoperátor és $(T_1|T_2) = \operatorname{Tr} T_1^* T_2$. Teljesül továbbá a Cauchy-egyenlőtlenség nemkommutatív változata:*

$$\|T_1 \cdot T_2\|_1 \le \|T_1\|_2 \cdot \|T_2\|_2\ .$$

Egy korlátos és egy Hilbert–Schmidt operátor bármilyen sorrendben vett szorzata ismét Hilbert–Schmidt operátor, amelyre

$$\|TX\|_2 = \|XT\|_2 \le \|X\| \cdot \|T\|_2\ .$$

Az eddig felsorolt operátor-osztályok a következő módon viszonyulnak egymáshoz:

$$\mathfrak{F}(\mathcal{H}) \subseteq \mathfrak{T}^1(\mathcal{H}) \subseteq \mathfrak{T}^2(\mathcal{H}) \subseteq \textit{(kompakt operátorok)} \ .$$

Ehhez elegendő, hogy $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$-ban $\|\cdot\|_1 \geq \|\cdot\|_2 \geq \|\cdot\|$ teljesül, ami pedig magától értetődő.

Minden önadjungált Hilbert–Schmidt operátor is előáll $T = \sum_j t_j |e_j\rangle\langle e_j|$ alakban, amely alaknál

$$\|T\|_2 = \sqrt{\textstyle\sum_j |t_j|^2} < \infty \ .$$

Ebből már látványosan

$$\operatorname{Tr} T^*T = \operatorname{Tr}|T|^2 = \sum\nolimits_j t_j^2 \leq \Big(\sum\nolimits_j t_j\Big)^2 = (\operatorname{Tr}|T|)^2 \ ,$$

bár ez egyébként levezethető az egész $\mathfrak{T}^2(\mathcal{H})$-ra, hiszen $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$-ban teljesül, így annak $\|\cdot\|_2$-Cauchy sorozatainak limeszeire átvihető.

2.2. Kvantumállapothoz rendelt $\mathfrak{L}^2$ terek

A fontos obszervábilisek nagy részét – persze csak ha $\mathcal{H}$ végtelen dimenziós – nemkorlátos operátorok reprezentálják. Ez temérdek komoly technikai probléma forrása a nemkommutatív esetben. Obszervábilisek összeadása például igen nehezen értelmezhető, ha azok nem korlátos operátorokhoz tartoznak (különösen ha az értelmezési tartományok metszete nem sűrű). Az itt megadott megközelítés nagyban megnöveli mozgásterünket nem-korlátos obszervábilisek használatánál. Ez egyrészt az első és második momentumok megadásánál lesz hasznunkra, valamint a Hilbert-tér struktúra alapján a Riesz-reprezentáció és a Cauchy-egyennlőtlenség használatára is módunk nyílik.

Bevezetjük a véges második momentumú valószínűségi változók Hilbert-terének nemkommutatív megfelelőjét. Ez – a véges szórású valószínűségi változók teréhez hasonlóan – hasznos eszköznek bizonyul a kvantumvalószínűség elméletében is. Többek közt az összeadás is könnyen megvalósítható lesz ezek körében.

Legyen S rögzített sűrűségoperátor és X, Y korlátos operátorok $\mathcal{H}$-n. Legyen

$$X \circ Y = \tfrac{1}{2}(XY + YX) \ .$$

Vezessük be a következő pre-Hilbert szorzást a korlátos önadjungált operátorok terén:

$$(Y|X)_S \triangleq \operatorname{Tr} S(Y \circ X) = \operatorname{Re}\operatorname{Tr} SYX \qquad \big(X, Y \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})\big) \ , \tag{2.4}$$

mellyel $(X|X)_S = \operatorname{Tr} SX^2$.

$\mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$ teljessé tétele a $\langle\cdot|\cdot\rangle_S$-re nézve valós Hilbert-tér, melyet $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ jelöl. Ennek elemei általában a következő módon reprezentálhatóak $\mathcal{H}$ nemkorlátos operátoraiként.

Az X szimmetrikus operátor négyzetesen összegezhető (integrálható) az $S = \sum_j s_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ sűrűségi operátorra nézve, ha $\sum_j s_j \|X\psi_j\|_2^2 < \infty$ (beleértve, hogy $s_j \neq 0$ esetén $\psi_j \in \mathcal{D}(X)$). Két ilyen operátort ekvivalensnek nevezünk, ha minden $s_j \neq 0$-ra $X_1\psi_j = X_2\psi_j$. Az X, Y négyzetesen összegezhető operátorokra legyen

$$(Y|X)_S \triangleq \sum_j s_j \cdot \tfrac{1}{2}\Big[\langle Y\psi_j|X\psi_j\rangle + \langle X\psi_j|Y\psi_j\rangle\Big] = \Re\sum_j s_j \langle X\psi_j|Y\psi_j\rangle \ .$$

(A sorozat a Cauchy-egyenlőtlenség miatt konvergens.) Ez korlátos X, Y esetén megegyezik a korábban definiált $\operatorname{Tr} S(Y \circ X)$ képlettel, hiszen épp annak kifejtését adja meg a $\{\psi_j\}$ bázis szerint.

2.4. Tétel. *$\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ elemei természetes módon azonosíthatóak a négyzetesen összegezhető operátorok ekvivalencia-osztályaival, melyek halmazát az előbb megadott skaláris szorzással látjuk el. Konkrétan: minden $\mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$-beli $\{X_n\}$ Cauchy-sorozathoz található olyan X négyzetesen összegezhető operátor, melyre $\lim_n (X_n - X|X_n - X) = 0$ és minden X négyzetesen integrálható operátor elő is áll így.*

A bizonyítás a pre-Hilbert terek teljessé tételének szokásos módszerét követve semmilyen különleges ötletet nem igényel. □

A Hilbert–Schmidt operátorok fogalmának ismeretében másképp is definiálhatjuk a négyzetesen összegezhetőeket. Tekintsük a

$$\sqrt{S} = \sum\nolimits_j \sqrt{s_j}|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$$

operátort, mely nyilván $\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})$-beli, $\left\|\sqrt{S}\right\|_2 = \sqrt{\operatorname{Tr} S} = 1$. Ekkor

$$\mathcal{R}(\sqrt{S}) = \left\{\psi \in \mathcal{H} \middle| \psi = \textstyle\sum_j \sqrt{s_j} c_j \psi_j\,,\ \sum_j |c_j|^2 < \infty\right\}\,.$$

2.5. Állítás. *Legyen az X szimmetrikus operátorra $\psi_j \in \mathcal{D}(X)$, ha $s_j > 0$. Így pontosan akkor négyzetesen összegezhető, ha X kiterjed $\mathcal{R}(\sqrt{S})$-re úgy, hogy $X\sqrt{S}$ Hilbert–Schmidt típusú. Továbbá ha még Y is ilyen, akkor*

$$(Y|X)_S = \operatorname{Tr}\tfrac{1}{2}\left[\left(Y\sqrt{S}\right)^*\left(X\sqrt{S}\right) + \left(X\sqrt{S}\right)^*\left(Y\sqrt{S}\right)\right] = \Re\operatorname{Tr}\left(Y\sqrt{S}\right)^*\left(X\sqrt{S}\right)\,.$$

Amennyiben X négyzetesen összegezhető, a kiterjesztést megadja az alábbi képlet:

$$X\left(\textstyle\sum_j \sqrt{s_j} c_j \cdot \psi_j\right) = \displaystyle\sum_j \sqrt{s_j} c_j \cdot X\psi_j \qquad \left(\textstyle\sum_j |c_j|^2 < \infty\right)\,,$$

ahol a definiáló sor a négyzetes összegezhetőség miatt konvergens. Az $X\sqrt{S}$ operátor Hilbert–Schmidt típusú, hiszen

$$\operatorname{Tr}\left(X\sqrt{S}\right)^*\left(X\sqrt{S}\right) = \sum\nolimits_j \left\|X\sqrt{S}\psi_j\right\|^2 \qquad \left(\textstyle\sum_j s_j \|X\psi_j\|^2 < \infty\right)$$

A tételben felírt képlet könnyen ellenőrizhető. Az első résznél a másik irány igazolása triviális. □

Megadunk egy hasznosabb formulát a belső szorzásra. Mivel minden Hilbert–Schmidt operátor nyomoperátor is, a következő kifejezés nyomoperátort ad $\mathcal{H}$-n:

$$X \circ S = \tfrac{1}{2}\left[\left(X\sqrt{S}\right)\cdot\sqrt{S} + \sqrt{S}\cdot\left(X\sqrt{S}\right)^*\right]\,.$$

Kihasználva a nyom ismert – és már igazolt – tulajdonságait nyerjük, hogy

$$(Y|X)_S = \operatorname{Tr}(X \circ S)Y \qquad \left(Y \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H}), X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\right)\,. \tag{2.5}$$

A nemkommutatív eset fontos sajátossága egy további, ferdén szimmetrikus forma $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-ben, mely az operátorok kommutátorához kapcsolódik. Lássuk, hogyan vezethetjük ezt be és milyen tulajdonságai lesznek.

Amennyiben X, Y (korlátos) önadjungáltak, úgy $\mathrm{i}[Y, X]$ is az. Ezáltal az

$$[Y|X]_S \triangleq \mathrm{i}\operatorname{Tr} S[Y, X] = 2\Im\operatorname{Tr} SXY$$

összefüggés valós bilineáris formát definiál $\mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$-n. Ez kiterjeszthető $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-re is:

$$[Y|X]_S = 2\operatorname{Im}\sum_j s_j\langle X\psi_j|Y\psi_j\rangle = 2\operatorname{Im}\operatorname{Tr}\left(X\sqrt{S}\right)^*\left(Y\sqrt{S}\right)\,.$$

Ha $X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$, akkor nyomoperátort ad az alábbi kifejezés:

$$[X,S] \triangleq \left(X\sqrt{S}\right)\cdot\sqrt{S} - \sqrt{S}\cdot\left(X\sqrt{S}\right)^* .$$

Korlátos Y esetén ez a jelölés felhasználható az $[Y|\cdot]_S\big|_{\mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})}$ lineáris funkcionál leírásához:

$$[Y|X]_S = \mathrm{i}\,\mathrm{Tr}[X,S]\cdot Y \qquad \left(X \in \mathfrak{L}^2(S), Y \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})\right) . \tag{2.6}$$

A $\mathrm{Tr}\,\sqrt{S}(X\sqrt{S})^*Y = \mathrm{Tr}(X\sqrt{S})^*(Y\sqrt{S})$ és a $\mathrm{Tr}(X\sqrt{S})\sqrt{S}Y = \mathrm{Tr}(\sqrt{S}Y)(X\sqrt{S}) = \mathrm{Tr}(Y\sqrt{S})^*(X\sqrt{S})$ összefüggéseket bátran kihasználhatjuk, mert $Y, \sqrt{S}$ korlátosak. Ezekkel pedig $[X|Y]_S$ azon alakjává alakul a jobb oldal, mellyel azt $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ felett definiáltuk. □

A forma ferdén szimmetrikus, azaz

$$\begin{aligned} [Y|X]_S &= -[X|Y]_S && \left(X,Y \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\right) , \\ [X|X]_S &= 0 && \left(X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\right) . \end{aligned}$$

A skaláris szorzásra az S-kommutátor segítségével adott képletbe $Y = I$-t helyettesítve

$$[I|X]_S = 0 \qquad \left(X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\right) . \tag{2.7}$$

Használni fogjuk még $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ komplexifikáltját. Minden $X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ egyértelműen áll elő $X = X_1 + \mathrm{i}X_2$ alakban, ahol X_1, X_2 önadjungált – ehhez $X_1 = \frac{1}{2}(X + X^*)$, $X_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}(X - X^*)$ lesz jó. Legyen most

$$(Y|X)_S = \mathrm{Tr}\,S(Y^* \circ X) = \mathrm{Tr}(S \circ Y)\cdot X^* \qquad \left(X,Y \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\right) .$$

Ez önadjungált esetben visszaadja a korábbi definíciót. Emellett könnyen ellenőrizhetően fennáll rá

$$(X|X)_S = (X_1|X_1)_S + (X_2|X_2)_S \qquad \left(X = X_1 + \mathrm{i}X_2;\ X_1, X_2 \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})\right) .$$

Jelölje az így megadott skaláris szorzattal pre-Hilbert térré tett $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$ teljessé tételét $\mathfrak{L}^2(S)$. Ennek minden X eleme egyértelműen áll elő $X = X_1 + \mathrm{i}X_2$ alakban úgy, hogy $X_1, X_2 \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ és érvényben marad az $(X|X)_S = (X_1|X_1)_S + (X_2|X_2)_S$ képlet. Azaz $\mathfrak{L}^2(S)$ az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ komplexifikáltja:

$$\mathfrak{L}^2(S) = \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S) \oplus \mathrm{i}\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S) .$$

Az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-beli $[\cdot|\cdot]_S$ ferde szorzás kiterjed $\mathfrak{L}^2(S)$-re; ez korlátos esetben a következő képlettel számolhatjuk ki:

$$(Y|X)_S = \mathrm{i}\,\mathrm{Tr}\,S[Y^*, X] = \mathrm{i}\,\mathrm{Tr}[X,S]Y^* \qquad \left(X,Y \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\right) .$$

További két hasznos komplex értékű pre-Hilbert szorzást emelünk ki $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$-n:

$$\begin{aligned} (Y|X)^+_S &\triangleq \mathrm{Tr}\,SXY^* \\ (Y|X)^-_S &\triangleq \mathrm{Tr}\,SY^*X \end{aligned} \qquad \left(X,Y \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\right) .$$

Jelölje a teljessé tétellel kapott megfelelő Hilbert-tereket $\mathfrak{L}^2_{\pm}(S)$.[1] $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$-n az eddig definiált pre-Hilbert szorzatokra $(Y|X)_S = \frac{1}{2}\left[(Y|X)^+_S + (Y|X)^-_S\right]$, tehát $(X|X)^{\pm}_S \le 2(X|X)_S$, következésképp $\mathfrak{L}^2(S) \subseteq \mathfrak{L}^2_{\pm}(S)$. Nem adódnak hát értelmezési gondok a következő összefüggéseknél:

$$\begin{aligned} (Y|X)_S \pm \tfrac{\mathrm{i}}{2}(Y|X)_S &= (Y|X)^{\pm}_S \\ (Y|X)_S &= \mathrm{i}\left((Y|X)^-_S - (Y|X)^+_S\right) \end{aligned} \qquad \left(X,Y \in \mathfrak{L}^2(S)\right) .$$

2.6. Állítás. *A $(\cdot|\cdot)_S$ és $[\cdot|\cdot]_S$ formák kapcsolatát a következő – ekvivalens – egyenlőtlenségek jellemzik:*

$$\begin{array}{lrl}
\text{(i)} & (X|X)_S \geq \ \tfrac{\mathrm{i}}{2}[X|X]_S & \big(X \in \mathfrak{L}^2(S)\big)\,, \\
\text{(ii)} & (X|X)_S \geq -\tfrac{\mathrm{i}}{2}[X|X]_S & \big(X \in \mathfrak{L}^2(S)\big)\,, \\
\text{(iii)} & (X_1|X_1)_S + (X_2|X_2)_S \geq \ [X_1|X_2]_S & \big(X_1, X_2 \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\big)\,, \\
\text{(iv)} & (X_1|X_1)_S \cdot (X_2|X_2)_S \geq \tfrac{1}{4}[X_1|X_2]^2_S & \big(X_1, X_2 \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\big)\,.
\end{array}$$

Az első kettő következik abból, hogy

$$(X|X)_S \pm \tfrac{\mathrm{i}}{2}[X|X]_S = (X|X)^{\pm}_S \geq 0 \qquad \big(X \in \mathfrak{L}^2(S)\big)\,.$$

Ekvivalensek, hiszen $(X|X)^+_S = (X^*|X^*)^-_S$ minden $X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})$ esetén. Legyen $X \in \mathfrak{L}^2(S)$, így $X = X_1 + \mathrm{i}X_2 \quad \big(X_1, X_2 \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\big)$. Felhasználva a tétel előtt $(\cdot|\cdot)_S$-ra adott képletet és $[\cdot|\cdot]_S$ ferdén szimmetrikus voltát:

$$0 \leq (X|X)^-_S = (X_1|X_1)_S + (X_2|X_2)_S - [X_1|X_2]_S\ .$$

Eszerint (i) és (iii) valóban ekvivalensek. (iii)-ban X_1 helyére tX_1-et írva – ahol t valós paraméter – és egy oldalra rendezve a kapott másodfokú egyenlőtlenség diszkriminánsa ≤ 0, ami épp (iv) átírása. (iv)$\Rightarrow$(iii) nyilvánvaló. $\square$

Az állítás (i) és (ii) összefüggéseit felhasználva bármely $X_1, \ldots, X_n \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-re

$$\big[\!\big[(X_j|X_k)_S\big]\!\big] \geq \pm\tfrac{\mathrm{i}}{2}\,\big[\!\big[[X_j|X_k]_S\big]\!\big]\ ,$$

ahol a baloldalon egy szimmetrikus $n \times n$-es valós mátrix áll, jobboldalt egy ferdén szimmetrikus valós mátrix $\pm\frac{\mathrm{i}}{2}$-szerese, így mint önadjungált $n \times n$-es mátrixok hasonlíthatóak össze.

Kimondjuk a (iv) összefüggés komplex változatát is:

$$(X_1|X_1)_S\,(X_2|X_2)_S \geq \tfrac{1}{4}\,\big|[X_1|X_2]_S\big|^2 \qquad \big(X_1, X_2 \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\big)\,.$$

Az iménti (iii) pont alapján

$$(X_1|X_1)_S + (X_2|X_2)_S \geq \Re[X_1|X_2]_S \qquad \big(X_1, X_2 \in \mathfrak{L}^2(S)\big)\,.$$

Ismét tX_1-et írva X_1 helyére és a diszkriminánst vizsgálva

$$(X_1|X_1)_S \cdot (X_2|X_2)_S \geq \tfrac{1}{4}\,(\Re[X_1|X_2]_S) \qquad \big(X_1, X_2 \in \mathfrak{L}^2(S)\big)\,.$$

Most $\lambda = [X_1|X_2]_S \cdot \big|[X_1|X_2]_S\big|^{-1}$ választás után X_1-et λX_1-re cserélve az igazolandó formulához jutunk.

A (2.8) és (2.13) képletek azt mutatják, hogy az imént lényegében a többdimenziós Fisher-információs határ határozatlansági relációs megfelelőjét/megfelelőit kaptuk meg. A rövidesen definiálandó $\mathfrak{D}$ és az 5.2 szakasz $\mathbf{J}_S$ jelölésmódjának ismeretében ez a kapcsolat szembeötlőbb lesz.

2.3. Véges második momentumú mérések. Határozatlansági reláció

A valószínűségszámításban a mértékhez tartozó $\mathfrak{L}^2$ tér elemei a véges második momentumú – véges szórású – valószínűségi változók. Nemkommutatív esetben $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ elemei és a véges második momentumú valós értékű mérések közt vonható ilyen párhuzam.

Legyen először X az S állapothoz véges második momentumú obszervábilis, melyet egy sűrűn definiált operátor reprezentál. Ekkor $X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$, hiszen az alábbi integrál értéke véges:

$$\sum_j s_j \, \|X\psi_j\|^2 = \sum_j s_j \int_{\mathbb{R}} x^2 \langle \psi_j | M(\mathrm{d}x) | \psi_j \rangle = \int x^2 \mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) \ .$$

Az első átalakításnál a sűrűn definiált operátorokra vonatkozó spektrálfelbontás tételét (A.1) használtuk, az átrendezés pedig a pozitivitás miatt volt jogos. Így a kompakt nyomoperátorok teréről való folytonos kiterjesztés adja a következőket:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_S(X) &= (\mathbf{1}|X)_S \\ \mathbf{D}^2_S(X) &= \big(X - \mathbf{E}_S(X) \,\big|\, X - \mathbf{E}_S(X)\big)_S \end{aligned} \qquad \big(X \in \mathfrak{L}^2(S)\big) \ .$$

Korlátos X-re persze az egyszerűbb

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_S(X) &= \operatorname{Tr} SX \\ \mathbf{D}^2_S(X) &= \operatorname{Tr} S\big(X - \mathbf{E}_S(X)\big)^2 \end{aligned} \qquad \big(X \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})\big)$$

képletekkel is számolhatunk.

Legyenek X_1, X_2 véges második momentumú obszervábilisek S-hez. Alkalmazzuk az előző fejezet utolsó állítását az $X_j - \mathbf{E}_S(X_j)$ változókra. Figyelembe véve, hogy $[I|X_j]_S = 0$, a határozatlansági reláció egy alakját kapjuk:

$$\mathbf{D}^2_S(X_1) \cdot \mathbf{D}^2_S(X_2) \geq \tfrac{1}{4}[X_1|X_2]^2_S \ . \tag{2.8}$$

Legyen most M tetszőleges OProM $\mathbb{R}$ felett, amelyre $\int x^2 \mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) < \infty$. Definiálni fogjuk az

$$X_M = {}^{\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)}\!\!\int x M(\mathrm{d}x)$$

úgy, hogy az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-ben konvergáljon és az M mérés várható értékére fennálljanak a következők:

$$\mathbf{E}_S(M) = (\mathbf{1}|X_M)_S \ , \tag{2.9}$$

$$\mathbf{D}^2_S(M) \geq \big(X_M - \mathbf{E}_S(M) \,\big|\, X_M - \mathbf{E}_S(M)\big)_S \ . \tag{2.10}$$

Először korlátos tartójú lépcsősfüggvényekre definiáljuk az $\int f(x) M(\mathrm{d}x)$ integrált, értelemszerűen $\sum_j f_j \cdot M\big(\{x | f(x) = f_j\}\big)$ értékkel. Aztán fedezzük fel, hogy erre $\big[\int f(x) M(\mathrm{d}x)\big]^2 \leq \int f^2(x) M(\mathrm{d}x)$ teljesül (az összehasonlítás a pozitív operátorok rendezése szerint értendő). Mindkét oldalra alkalmazva a $\operatorname{Tr} S(\,\cdot\,)$ – pozitív! – funkcionált nyerjük, hogy

$$\Big(\int f(x) M(\mathrm{d}x) \Big| \int f(x) M(\mathrm{d}x)\Big)_S \leq \int f^2(x) \mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) \ . \tag{2.11}$$

Ezért az integrálás a szokott módon kiterjeszthető az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(\mathbf{P}_S)$ térre és eredménye egy $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-beli operátor lesz, melyre (2.11) továbbra is érvényben marad.

Ha komplex értékű függvényekkel is foglalkozunk, azaz áttérünk a $\mathfrak{L}^2(\mathbf{P}_S)$ térre, az azon való integrálást a $(\,\cdot\,|\,\cdot\,)^{\pm}_S$ mértékek bármelyike szerinti konvergenciával értelmezhetjük, az eredmény így persze a megfelelő $\mathfrak{L}^2_{\pm}(S)$ egy operátora lesz. Nyilván mindkét esetben kiterjesztését kapjuk az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(\mathbf{P}_S) \mapsto \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ integrálásnak. A (2.11) egyenlet az alábbira változik komplex esetben:

$$\Big(\int f(x) M(\mathrm{d}x) \Big| \int f(x) M(\mathrm{d}x)\Big)^{\pm}_S \leq \int \big|f(x)\big|^2 \mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) \ . \tag{2.12}$$

Ennyi mindent már érdemes tételben kimondani:

2.7. Tétel. *Legyen f valós vagy komplex értékű, $\mathbf{P}_S$ szerint négyzetesen integrálható függvény. Ha az $\int f(x)M(\mathrm{d}x)$ operátort az $\int f_n(x)M(\mathrm{d}x)$ operátorok $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ illetve $\mathfrak{L}^2_{\pm}(S)$ térbeli limeszeként értelmezzük – ahol $f_n \xrightarrow[\mathfrak{L}^2(\mathbf{P}_S)]{} f$ egyszerű függvények tetszőleges sorozata –, akkor a definíció értelmes. Továbbá teljesülnek a következők:*

$$\left(\int f(x)M(\mathrm{d}x)\middle|\int f(x)M(\mathrm{d}x)\right)_S \le \int f^2(x)\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) \qquad \left(f\in\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(\mathbf{P}_S)\right),$$

$$\left(\int f(x)M(\mathrm{d}x)\middle|\int f(x)M(\mathrm{d}x)\right)^{\pm}_S \le \int |f(x)|^2\,\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x) \qquad \left(f\in\mathfrak{L}^2\left(\mathbf{P}_S\right)\right).$$

E tétel alapján igazolhatjuk a (2.9) és (2.10) képleteket. Megjegyezzük, hogy ha M PProM, akkor utóbbiban is egyenlőség áll fenn.

Nyilván elég a megjegyzéshez annyit belátni, hogy $\left(X_M\middle|X_M\right)_S = \int x^2\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x)$. Lássuk hát ennek igazolását.

Legyen $\widetilde{x}^{(n)}:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$, $\widetilde{x}^{(n)} \xrightarrow[\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(\mathbf{P}_S)]{} \mathrm{id}_{\mathbb{R}}$ egyszerű függvények sorozata, $\widetilde{x}^{(n)} \triangleq \sum_k x_k^{(n)}\chi_{B_k^{(n)}}$ és $X_M^{(n)} = \int \widetilde{x}^{(n)}M(\mathrm{d}x) = \sum_k x_k^{(n)}\cdot M\left(B_k^{(n)}\right)$.

$$(X_M|X_M)_S = \lim_n\left(X_M^{(n)}\middle|X_M^{(n)}\right)_S = \lim_n\sum_j\left\langle X_M^{(n)}\sqrt{S}\psi_j\middle|X_M^{(n)}\sqrt{S}\psi_j\right\rangle = \lim_n\sum_j\left\|\sqrt{s_j}X_M^{(n)}\psi_j\right\|^2$$
$$= \lim_n\sum_j s_j\left\|\textstyle\sum_k x_k^{(n)}M\left(B_k^{(n)}\right)\psi_j\right\|^2 \le \dots$$

A következő sorbeli és ezen kifejezés között akkor van már a limeszen belül egyenlőség, ha az $s_j\neq 0$, $x_k^{(n)}\cdot x_m^{(n)}\neq 0$ esetekben $\left\langle M\left(B_k^{(n)}\right)\psi_j\middle|M\left(B^{(n)}\right)\psi_j\right\rangle = \delta_{km}\cdot\left\|M\left(B_k^{(n)}\right)\psi_j\right\|^2$ áll. Ha M PProM, akkor egyszerűen $M\left(B_k^{(n)}\right)M\left(B_m^{(n)}\right) = \delta_{km}M^2\left(B_k^{(n)}\right)$, ami bőven elég.

$$\dots \le \lim_n\sum_j s_j\sum_k\left(x_k^{(n)}\right)^2\left\|M\left(B_k^{(n)}\right)\psi_j\right\|^2 = \dots$$

A pozitivitás miatt felcserélhetjük a két összegzést.

$$\dots = \lim_n\sum_k\left(x_k^{(n)}\right)^2\sum_j\left\langle\psi_j\middle|M\left(B_k^{(n)}\right)^2S\middle|\psi_j\right\rangle = \lim_n\sum_k\left(x_k^{(n)}\right)^2\operatorname{Tr}SM^2\left(B_k^{(n)}\right).$$

Ha M PProM, akkor minden mérhető B-re $M^2(B) = M(B)$, így éppen $\lim_n\int\left(\widetilde{x}^{(n)}\right)^2\cdot\operatorname{Tr}SM(\mathrm{d}x) = \int x^2SM(\mathrm{d}x)$ szerepel a képletsor végén. Így a megjegyzésnek megfelelően

$$(X_M|X_M)_S = \int x^2\mu_S(\mathrm{d}x)\,.$$

Mindezt formálisan számolva áttekinthetőbben kiszámolhatjuk (bár a számolás menetét kicsit meg kell változtatni, mert $\operatorname{Tr}SM^2(\mathrm{d}x)$ nem mérték, így a megfelelő összeg az előbbieknél nem egy integrál közelítő összege volt). M PProM voltát az $M(\mathrm{d}x)M(\mathrm{d}y) = \delta_{xy}M(\mathrm{d}x)$ átalakításnál használjuk ki, a különböző összegzési operációk a pozitivitás miatt cserélhetőek fel:

$$\left(X_M\middle|X_M\right)_S = \operatorname{Tr}\left(X_M\sqrt{S}\right)^*\left(X_M\sqrt{S}\right) = \sum_j\left\langle X_M\sqrt{S}\psi_j\middle|X_M\sqrt{S}\psi_j\right\rangle$$
$$= \sum_j s_j\left\langle\left(\textstyle\int xM(\mathrm{d}x)\right)\psi_j\middle|\left(\textstyle\int yM(\mathrm{d}y)\right)\psi_j\right\rangle = \sum_j s_j\left\langle\psi_j\middle|\textstyle\iint xy\cdot M^*(\mathrm{d}x)M(\mathrm{d}y)\middle|\psi_j\right\rangle$$
$$= \sum_j s_j\left\langle\psi_j\middle|\textstyle\int x^2M(\mathrm{d}x)\middle|\psi_j\right\rangle = \textstyle\sum_j s_j\operatorname{Tr}\left(\int x^2M(\mathrm{d}x)|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\right)$$
$$= \sum_j\int x^2\operatorname{Tr}s_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j|\,M(\mathrm{d}x) = \int x^2\operatorname{Tr}SM(\mathrm{d}x) = \int x^2\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x)\,.$$

2.8. Megjegyzés. A tétel számunkra legfontosabb üzenete – kiegészítve a függelék A.1 tételével – az, hogy mindazon $M(\mathrm{d}x)$ valós értékű, véges második momentumú mérések, amelyek nem állnak elő egy obszervábilis spektrálmértékeként, bátran helyettesíthetőek az identitás szerintük való X integráltja mint obszervábilis mérésével. Ugyanis annak $\bar{M}(\mathrm{d}x)$ spektrálmértékére $\mathbf{E}_S(\bar{M}) = \operatorname{Tr} SX_M = \mathbf{E}_S(M)$, továbbá $\mathbf{D}_S^2(\bar{M}) = (X|X)_S \leq \mathbf{D}_S^2(M)$. Sőt, ez minden véges második momentumú (valós) függvényükre is igaz. Mivel mi alapvetően minél hatásosabb torzítatlan becsléseket keresünk, M helyett mindig $\bar{M}$-t preferáljuk.

Ennek megfelelően a jövőben minden olyan esetben, ahol ez kényelmesebbé teszi a számolást, az obszervábilisekkel reprezentálható mérésekre szorítkozunk. A $\mathbf{D}_S^2(M) = (X_M|X_M)_S$ képlet használata minden esetben ezen egyszerűsítés alkalmazására utal.[2]

A (2.10) képlet és a 2.6 állítás alapján kapjuk a határozatlansági reláció igen általános változatát:

$$\mathbf{D}_S^2(M_1) \cdot \mathbf{D}_S^2(M_2) \geq \tfrac{1}{4}[X_{M_1}|X_{M_2}]^2 \ , \tag{2.13}$$

mely tetszőleges véges második momentumú M_1 és M_2 mérésekre fennáll. Az (2.8) formulával ellentétben olyankor is alkalmazható, amikor $M_1(\mathrm{d}x_1)$ és $M_2(\mathrm{d}x_2)$ valamely $M(\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2)$ marginális mérései.[3]

A Cramér–Rao típusú becslések mellett a határozatlansági reláció különféle alakjai a leggyakrabban használt alsó becslések mérések szóródására. Előnyük, hogy nem paraméteresek, így nyilván nem igénylik a várható érték paraméterfüggésének ismeretét. [Hol82, VI] viszonylag általános példái szerint olyan helyzetekben, amikor mindkét becslés használata szóba jöhet, általában a Cramér–Rao típusú erősebb.

2.4. Négyzetesen összegezhető operátorok mátrix-reprezentációja

$\mathfrak{L}^2$ terek elemei természetes módon megfeleltethetőek végtelen mátrixoknak. Először – az egyszerűség kedvéért – tételezzük fel, hogy az S állapot hű. Az $S = \sum_j s_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j|$ jelöléssel az $E_{jk} \triangleq |\psi_j\rangle\langle\psi_k|$ mátrix-egységek ortogonális bázist adnak az $\mathfrak{L}^2(S)$, $\mathfrak{L}^2_\pm(S)$ terekben, továbbá

$$(E_{jk}|E_{jk})_S^+ = s_j \ , \qquad (E_{jk}|E_{jk})_S^- = s_k \ , \qquad (E_{jk}|E_{jk})_S = \tfrac{1}{2}(s_j + s_k) \ .$$

Mondjuk lássuk ezt be $\mathfrak{L}^2(S)$-re. Ha $X \in \mathfrak{L}^2(S)$, akkor a (2.5) egyenlet szerint

$$(E_{jk}|X)_S = \tfrac{1}{2}(s_j + s_k)\langle\psi_j|X|\psi_k\rangle \ .$$

Speciálisan $(E_{jk}|E_{j'k'})_S = \delta_{jj'}\delta_{kk'}$. A teljesség pedig annak következménye, hogy $(E_{jk}|X)_S = 0 \quad (\forall j,k)$ esetén $X\psi_k = 0 \quad (\forall k)$ és így $\mathfrak{L}^2(S)$-ben $X = 0$.

Így hát bármely X négyzetesen összegezhető operátor megadható

$$X = \sum_{j,k}^{\mathfrak{L}^2(S)} x_{jk}E_{jk} = \sum_{j,k} |\psi_j\rangle\langle\psi_j|X|\psi_k\rangle\langle\psi_k| \qquad \big(X \in \mathfrak{L}^2(S)\big) \tag{2.14}$$

alakban, ahol

$$x_{jk} = \langle\psi_j|X|\psi_k\rangle = \frac{(E_{jk}|X)_S}{(E_{jk}|E_{jk})_S} \ .$$

[2] Ahhoz, hogy ezt az érvelést a kovariancia általános eseteire is érvényesnek tekinthessük, azt kellene kimondanunk, hogy M az $\bar{M}$ randomizáltja. Ez – esetleg néhány technikai feltételhez kötve – minden bizonnyal igaz, de ezzel a kérdéssel nem fogunk foglalkozni.

[3] Vegyük észre, hogy a határ csak akkor érdekes, ha a két mérés *nem* kompatibilis, vagyis a mérés nem a marginálisainak szorzata.

Ezzel a korlátos önadjungált operátorok mátrix-reprezentációjának (Holevo §II.1.13) kiterjesztését kaptuk.

Térjünk most át $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ vizsgálatára. A (2.14) előállítás persze helyes lenne $X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ esetén is, csakhogy $j \neq k$-ra $E_{jk} \notin \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$, valamint az x_{jk} elemek általában komplex számok. Legyen ezért

$$C_{jk} = \tfrac{1}{2}(E_{jk} + E^*_{jk}) = \tfrac{1}{2}(E_{jk} + Ekj)\,, \qquad\qquad S_{jk} = \tfrac{1}{2\mathrm{i}}(E_{jk} - E_{kj})\,.$$

$\{C_{jk}|j \leq k\} \cup \{S_{jk}|j < k\}$ már ortogonális bázist ad $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-ben és

$$X = {}^{\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)}\!\!\sum_{j \leq k} \alpha_{jk} C_{jk} + {}^{\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)}\!\!\sum_{j<k} \beta_{jk} S_{jk} \qquad\qquad \left(X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\right)\,,$$

persze $\alpha_{jk}, \beta_{jk} \in \mathbb{R}$.

Legyen most S tetszőleges sűrűségi operátor. Vezessük be a $\mathbf{J}_0 = \{j|s_j = 0\}$, $\mathbf{J}_1 = \{j|s_j \neq 0\}$ felosztást az indexhalmazon. Ekkor S a következő diagonális blokkmátrix alakra hozható:

$$\left[\begin{array}{cccc:c} s_1 & & & 0 & \\ & \ddots & & & 0 \\ & & s_j & & \\ 0 & & & \ddots & \\ \hdashline & & 0 & & 0 \end{array}\right]$$

Tekintsük először az $\mathfrak{L}^2_+(S)$ teret. Mivel $(E_{jk}|E_{jk})^+_S = 0$ ha $j \in \mathbf{J}_0$, az $\mathfrak{L}^2_+(S)$ ortogonális bázisa $\left\{E_{jk}\middle|j \in \mathbf{J}_0, k \in \mathbf{J}_) \cup \mathbf{J}_1\right\}$. Ezért az $\mathfrak{L}^2_+(S)$ egy tetszőleges eleme az alábbi blokkmátrixszal reprezentálható:

$$X = \left[\begin{array}{c:c} X_{11} & X_{10} \\ \hdashline * & * \end{array}\right] \qquad \left(X \in \mathfrak{L}^2_+(S)\right)\,,$$

ahol X_{JK}-ba a $(\psi_j|X|\psi_k)^+_S \quad \left(j \in \mathbf{J}_J, k \in \mathbf{J}_K\right)$ mátrixelemek tartoznak. A csillagozott rész tetszőleges, így akár nullának is választható, hiszen az $\mathfrak{L}^2_+(S)$-t definiáló ekvivalencia épp ezeket nem veszi figyelembe. $\mathfrak{L}^2_-(S)$ elemeit hasonlóan,

$$X = \left[\begin{array}{c:c} X_{11} & * \\ \hdashline X_{01} & * \end{array}\right] \qquad \left(X \in \mathfrak{L}^2_-(S)\right)$$

alakban reprezentálhatjuk. $\mathfrak{L}^2(S)$ mátrixreprezentációjánál $(E_{jk}|E_{jk})_S = 0$ pontosan $j, k \in \mathbf{J}_0$-ra áll fenn, így a bázis $\{E_{jk}|(j,k) \notin \mathbf{J}_0 \times \mathbf{J}_0\}$, a reprezentáció pedig:

$$X = \left[\begin{array}{c:c} X_{11} & X_{10} \\ \hdashline X_{01} & * \end{array}\right] \qquad \left(X \in \mathfrak{L}^2(S), X^*_{11} = X_{11}, X^*_{10} = X_{01}\right)\,.$$

Különösen egyszerű képet kapunk, ha $S = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ tiszta állapot. Ekkor

$$\mathfrak{L}^2_+(S) = \left\{ X = \left[\begin{array}{c} x_{11}\ x_{12}\ \cdots \\ \hdashline * \end{array}\right] \middle| \sum_k |x_{ik}|^2 < \infty \right\}\,.$$

A mátrix érdektelen részét nullává téve $X = |\psi_1\rangle\langle\psi| \quad \left(\psi \in \mathcal{H}\right)$, vagyis $\mathfrak{L}^2_+(S)$ természetes módon izomorf $\mathcal{H}^*$-gal. Ugyanígy

$$\mathfrak{L}^2_-(S) = \left\{ X = \left[\begin{array}{c:c} x_{11} & \\ x_{12} & * \\ \vdots & \end{array}\right] \middle| \sum_j |x_{j1}|^2 < \infty \right\}$$

elemei lényegében a $|\phi\rangle\langle\psi_1| \quad \left(\phi \in \mathcal{H}\right)$ mátrixok, ez $\mathfrak{L}^2_-(S)$ és $\mathcal{H}$ közt létesít izomorfiát. Végül,

$$\mathfrak{L}^2(S) = \left\{ X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots \\ x_{21} & & \\ \vdots & & * \end{bmatrix} \middle| \sum_j |x_{1j}|^2 + |x_{j1}|^2 < \infty \right\} ,$$

elemei lényegében $X = |\psi_1\rangle\langle\psi| + |\varphi\rangle\langle\psi_1| \quad (\varphi, \psi \in \mathcal{H})$ alakúak. $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ elemei ezen felül még szimmetrikusak is, tehát $X = |\psi_1\rangle\langle\psi| + |\psi\rangle\langle\psi_1| \quad (\psi \in \mathcal{H})$ alakra hozhatóak.

2.5. Állapot kommutátor-operátora

A 2.6 állítás szerint a $[\cdot|\cdot]_S$ forma folytonos $\mathfrak{L}^2(S)$-en. Ezért reprezentálható

$$[Y|X]_S = (Y|\mathfrak{D}_S X)_S \tag{2.15}$$

alakban, ahol $\mathfrak{D} \triangleq \mathfrak{D}_S \in \mathfrak{B}(\mathfrak{L}^2(S))$ (komplex) lineáris operátor, melyet az S állapot kommutátor-operátorának nevezünk. Minthogy $[\cdot|\cdot]_S$ ferdén szimmetrikus, $\mathfrak{D}$ is az, vagyis $\mathfrak{D}^* = -\mathfrak{D}$. A 2.6 állítás állítás egyenlőtlenségeit most igen röviden is felírhatjuk:

$$1 \pm \tfrac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D} \underset{\mathbb{SA}(\mathfrak{L}^2(S))}{\geq} 0 , \qquad \text{ennek következtében}$$

$$\left(1 + \tfrac{1}{4}\mathfrak{D}^2\right) = \left(1 + \tfrac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D}\right)\left(1 - \tfrac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D}\right) \underset{\mathbb{SA}(\mathfrak{L}^2(S))}{\geq} 0 .$$

Mivel az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ térre megszorítva a $(\cdot|\cdot)_S$ és $[\cdot|\cdot]_S$ formák valósak, ez invariáns altere $\mathfrak{D}$-nek. Arra megszorítva $\mathfrak{D}$ tehát (valós) lineáris operátor, melyre $1 + \frac{1}{4}\mathfrak{D}^2 \geq 0$. A (2.7) egyenlőség értelmében

$$\mathfrak{D} I = 0 .$$

Szeretnénk pontosabban megismerni $\mathfrak{D}$ hatását. Először is vegyük észre, hogy korlátos X és Y esetén (2.15)-ből (2.5) és (2.6) felhasználásával

$$\mathrm{i}\,\mathrm{Tr}[X, S]Y^* = \mathrm{Tr}\left((\mathfrak{D}X) \circ S\right) Y^* .$$

Eszerint $Z = \mathfrak{D}X$ a következő egyenlet megoldása $\mathfrak{L}^2(S)$-ben:[4]

$$Z \circ S = \mathrm{i}[X, S] .$$

Ezt az egyenletet a nemrég bemutatott mátrix-reprezentáció segítségével oldjuk meg. Mindkét oldalt $\langle\psi_j|\cdot|\psi_k\rangle$ szendviccsé transzformálva

$$\tfrac{1}{2}(s_j + s_k)\langle\psi_j|Z|\psi_k\rangle = \mathrm{i}(s_k - s_j)\langle\psi_j|X|\psi_k\rangle , \qquad \text{amiből } Z \text{ mátrixelemei:}$$

$$\langle\psi_j|Z|\psi_k\rangle = \frac{2\mathrm{i}(s_k - s_j)}{s_k + s_j}\langle\psi_j|X|\psi_k\rangle .$$

$\mathfrak{D}$ hatására az egyes x_{jk} mátrixelemek $2\mathrm{i}(s_k - s_j)(s_k + s_j)^{-1}$-szeresre változnak:

$$\mathfrak{D}([\![x_{jk}]\!]) = \left[\!\!\left[\frac{2\mathrm{i}(s_k - s_j)}{s_k + s_j} x_{jk}\right]\!\!\right] .$$

Így hát $\{E_{jk}\}$ a $\mathfrak{D}$ sajátvektoraiból álló bázis $\mathfrak{L}^2(S)$-ben és bármely (jól approximálható) $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ függvényre

$$f(\mathfrak{D})([\![x_{jk}]\!]) = \left[\!\!\left[f\left(\frac{2\mathrm{i}(s_k - s_j)}{s_k + s_j}\right) x_{jk}\right]\!\!\right] .$$

[4] Ha Z és Z' egyaránt megoldás, akkor $(Z - Z') \circ S = 0$ alapján $\mathfrak{L}^2(S)$-ben $Z - Z' = 0$.

Konkrétan a következő fügvények esetében érdekel ez minket:

$$\left(1+\tfrac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D}\right)\left([\![x_{jk}]\!]\right)=\left[\!\!\left[\frac{2s_j}{s_j+s_k}\,x_{jk}\right]\!\!\right]\ ,$$

$$\left(1-\tfrac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D}\right)\left([\![x_{jk}]\!]\right)=\left[\!\!\left[\frac{2s_k}{s_j+s_k}\,x_{jk}\right]\!\!\right]\ ,$$

$$\left(1+\tfrac{1}{4}\mathfrak{D}^2\right)\left([\![x_{jk}]\!]\right)=\left[\!\!\left[\frac{2s_js_k}{(s_j+s_k)^2}\,x_{jk}\right]\!\!\right]\ ,$$

hiszen ezek kapcsolódnak a határozatlansági relációk alapjául szolgáló 2.6 állításhoz.

A fenti képletek alapján nyilvánvaló például a következő:

2.9. Állítás. *Az S állapot pontosan akkor hű, ha az $1\pm\frac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D}$, $1+\frac{1}{4}\mathfrak{D}^2$ operátorok legalább egyike nem-elfajuló; ez esetben pedig egyikük sem az és*

$$\left(1\pm\tfrac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D}\right)^{-1}=\left(1+\tfrac{1}{4}\mathfrak{D}^2\right)^{-1}\left(1\mp\tfrac{\mathrm{i}}{2}\mathfrak{D}\right)\ .$$

3. Cramér–Rao egyenlőtlenség a klasszikus statisztikában

3.1. Elégségesség, teljesség, exponenciális család

A klasszikus statisztika egy fontos, sok optimalitási és „kényelmi" tulajdonsággal rendelkező osztályát alkotják az exponenciális családok. E jellemzők közül emelünk ki néhányat, mielőtt bevezetnénk a fogalom kvantumos megfelelőjét. A definiált fogalmaknál a jelölések az $\big(\mathcal{X}, \mathcal{A}, \mathcal{P} = \{\mathbf{P}_\vartheta | \vartheta \in \Theta\}\big)$ statisztikai mezőre vonatkoznak.[1]

3.1. Definíció (elégségesség). *$\mathcal{F} \subseteq \mathcal{B}$ elégséges σ-algebra, ha a $\mathbf{P}_\vartheta(X \in \mathcal{A}|\mathcal{F})$ feltételes eloszlásoknak létezik ϑ-tól független változata. A T statisztika elégséges, ha az általa generált σ-algebra az.*

Ez gyakorlatilag azt fejezi ki, hogy a ϑ paramétertől az $\mathcal{A}$ feletti $\mathbf{P}_\vartheta$ eloszlás csak annyiban függ, amennyire $\mathcal{F}$-re vett megszorítása függ tőle: az eloszlások között nincs „$\mathcal{F}$-nél finomabb" eltérés. A T statisztikára nézvést ez annyit jelent, hogy eloszlása minden olyan információt tartalmaz ϑ-ról, amit $\mathbf{P}_\vartheta$ tartalmaz. A következő tétel viszonylag mechanikusan igazolható:

3.2. Tétel. *Dominált statisztikai mezőn ekvivalensek az alábbiak:*

- *$\mathcal{F}$ elégséges.*
- *A $\mathcal{P}$-vel ekvivalens[2] μ valószínűségi mértékre vonatkozó sűrűségfüggvények mindegyikének van $\mathcal{F}$-mérhető változata.*
- *Tetszőleges λ domináló mértékre nézve a sűrűségfüggvény (λ-mm. x-re érvényesen) felírható $f_\vartheta(x) = h(x) \cdot g_\vartheta(x)$ alakban úgy, hogy g_ϑ $\mathcal{F}$-mérhető.* $\square$

Az elégségesség és a hatásosság kapcsolatáról többek közt a következőt tudjuk:

3.3. Tétel (Blackwell–Rao). *Amennyiben T elégséges statisztika ϑ-ra és V a paraméter $g(\vartheta)$ függvényének torzítatlan becslése, úgy létezik T-nek olyan U függvénye, mely szintén torzítatlan ϑ-ra és varianciája nem magasabb. Speciálisan, ha létezik hatásos becslés, akkor az az elégséges statisztika függvényének is választható.* $\square$

3.4. Definíció. Minimális elégséges σ-algebra alatt persze az elégséges σ-algebrák közt tartalmazásra minimális elemet értünk. Minimális elégséges statisztika az a T, amelynek minden elégséges statisztika finomítása, azaz bármely T' elégséges statisztikára $T = f(T')$ teljesül alkalmas f függvénnyel.

Sajnos a fenti értelemben nem feltétlenül létezik minimális elégséges σ-algebra. Valójában az elégséges σ-algebrák helyett – azok mértékelméleti értelemben vett – $\mathcal{P}$-teljessé tételét[3] célszerű tekinteni és azok közt keresni meg a legszűkebbet.[4] Ez már mindig létezik és egyértelmű.

[1] Az állítások, tételek bizonyításai megtalálhatóak például a [Leh97] és [Zac71] könyvekben.

[2] jellemzően: $\mathcal{P}$ elemeiből kikevert

[3] azt a legszűkebb σ-algebrát, amely a kiindulásul vett σ-algebra mellett tartalmazza minden $\mathcal{P}$-nullmértékű halmaz minden részhalmazát is

[4] A problémát az okozza, hogy az elégségesség – a fenti tételben megadott második tulajdonság alapján – nem feltétlenül öröklődik σ-algebrák metszetére sem. Ha a sűrűségfüggvénynek egyik változata $\mathcal{F}_1$-mérhető, másik változata $\mathcal{F}_2$-mérhető, attól még nem feltétlenül létezik $\mathcal{F}_1 \cap \mathcal{F}_2$-mérhető változata is, erre könnyű példát találni. Mértékelméletileg teljes σ-algebránál ha a sűrűségfüggvény egy változata mérhető, akkor mind az, így a probléma nem merül fel.

3.5. Állítás. *Ha egy dominált eloszláscsaládban (a sűrűségfüggvénynek van olyan változata, hogy)*

$$T(x) = T(y) \qquad \Longleftrightarrow \qquad \frac{f_\vartheta(x)}{f_\vartheta(y)} \text{ nem függ } \vartheta\text{-tól,}$$

akkor T minimális elégséges statisztika.

3.6. Definíció (teljesség). *A T statisztika* (korlátosan) teljes, *ha minden $\phi(T)$ (korlátos) valós értékű függvényére teljesül:*

$$\mathbf{E}_\vartheta(\phi(T)) = 0 \quad \big(\forall \vartheta \in \Theta\big) \qquad \Longrightarrow \qquad \phi(T) \underset{\mathcal{P}\text{–}mm.}{=} 0\,.$$

Egy minimális elégséges statisztika a legtömörebb olyan információ, amely még mindent tartalmaz ϑ-ról, ami a statisztikai mező segítségével megtudható. Ezért érdekes a következő:[5]

3.7. Tétel. *Ha T korlátosan teljes, elégséges statisztika, akkor minimális elégséges.* □

3.8. Definíció (exponenciális eloszláscsalád). Ha egy $\Theta \subseteq \mathbb{R}^p$ halmaz elemeivel paraméterezett, dominált eloszláscsaládban a sűrűségfüggvény előáll

$$f_\vartheta(x) = h(x) \cdot \exp\Big\{\gamma(\vartheta)^\top T(x) + \beta(\vartheta)\Big\} \qquad \left| \begin{array}{l} h : \mathcal{X} \to \mathbb{R}_\oplus, \quad h \not\equiv 0 \\ \gamma : \Theta \to \mathbb{R}^k \\ T : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^k \\ \beta : \Theta \to \mathbb{R} \end{array} \right.$$

alakban – ahol még T egyértelműsége kedvéért kikötjük, hogy $1, \gamma_1(\vartheta), \ldots, \gamma_k(\vartheta)$ lineárisan független függvények[6] – akkor *k-paraméteres exponenciális családnak nevezzük.*

A család *természetes paraméterezésű*, ha $k = p$ és $\gamma(\vartheta) \equiv \vartheta$. A $h(x)$, $T(x)$ párhoz tartozó *természetes paramétertér* azon $\vartheta \in \mathbb{R}^k$ pontok halmaza, melyekre az $\int_{\mathcal{X}} h(x) \cdot \exp\big\{\vartheta^\top T(x)\big\}\, \lambda(\mathrm{d}x)$ integrál konvergens: ezekre lehet a $\beta(\vartheta)$ normalizációs tényezőt úgy megválasztani, hogy valószínűség-eloszlást kapjunk. *Teljes exponenciális család* egy természetes paraméterezésű exponenciális család a természetes paramétertérrel, amelynek belseje ráadásul nemüres.

3.9. Állítás. *Exponenciális családban a definíció jelöléseivel T minimális elégséges statisztika.* □

3.10. Állítás. *A természetes paramétertér konvex és az affin burkában relatív nyílt.* □

3.11. Tétel. *Exponenciális családban ha $\gamma(\Theta)$-nak van belső pontja, akkor a T statisztika teljes.* □

[5] Valójában a teljesség fogalma szándékosan úgy definiáltatott, hogy ha T teljes és $\phi(T)$ elégséges T-re, akkor T is elégséges legyen ϕ-re. A teljességen keresztül sokszor könnyebb ellenőrizni az elégséges statisztika minimális voltát, ezért érdemes önálló tulajdonságként bevezetni.

[6] Persze ha $f_\vartheta(x)$ előáll ilyen alakban úgy, hogy a függetlenségi feltétel nem teljesül, akkor található olyan alak is, amellyel már igen. Ezért a függetlenségtől néha eltekinthetünk, ha csak megadni akarjuk az eloszlásokat, de T rövidesen kimondásra kerülő tulajdonságait nem kell használnunk.

3.2. Cramér–Rao-tétel, Fisher-féle információs határ

A következőkben a ϑ szerinti deriválást $(\,\cdot\,)_{/\vartheta}$, a ϑ szerinti logaritmikus deriválást $(\,\cdot\,)_{//\vartheta}$ alsó indexszel jelöljük.

3.12. Cramér–Rao-tétel, általános alak. *Legyen $X \in \mathcal{X}$ minta a $\Theta \subseteq \mathbb{R}^p$ nyílt paramétertartomány ϑ eleme által megadott eloszlásból. Legyen továbbá adott egy $w : \mathcal{X} \times \Theta \to \mathbb{R}^l$ rizikófüggvény*[7] *(„score-függvény"), a becsülendő $g : \Theta \to \mathbb{R}^k$ függvény és a $T : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^k$ torzítatlan becslés. Vezessük be a*

$$B(\vartheta) = \mathbf{\Sigma}_\vartheta\big(w(X;\vartheta)\big)\ , \qquad B(\vartheta) \in \mathbb{R}^{l\times l}\ ;$$
$$G(\vartheta) = \mathrm{cov}_\vartheta\big(T, w(X;\vartheta)\big)\ , \qquad G(\vartheta) \in \mathbb{R}^{k\times l}\ ;$$

jelöléseket. Tegyük fel, hogy $B(\vartheta)$ invertálható. Ekkor

$$\mathbf{\Sigma}_\vartheta(T) \geq G(\vartheta)\cdot B(\vartheta)^{-1}\cdot G(\vartheta)^\top\ .$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{\Sigma}_\vartheta\big(T - GB^{-1}w\big) &\geq 0\\
\mathbf{\Sigma}_\vartheta T - GB^{-1}\mathbf{\Sigma}_\vartheta(w)\,B^{-1}G^\top - \mathrm{cov}_\vartheta\,(T,w)\,B^{-1}G^\top - GB^{-1}\,\mathrm{cov}_\vartheta\,(T,w) &\geq 0\\
\mathbf{\Sigma}_\vartheta T + GB^{-1}BB^{-1}G^\top - GB^{-1}G^\top - GB^{-1}G^\top &\geq 0\\
\mathbf{\Sigma}_\vartheta T &\geq GB^{-1}G^\top \quad \square
\end{aligned}$$

Mint a bizonyítás hossza is sejteti, a tétel jelentőségét nem nehézsége adja, hanem hogy megfelelően választott w függvénnyel – még ha ez meglepőnek is tűnhet – meglehetősen jó becslést nyerhetünk belőle.

3.13. Definíció. Legyen a statisztikai mező a fentieknek megfelelő, λ domináló mérték az eloszláscsaládhoz, $x \mapsto f_\vartheta(x)$ a ϑ paraméterhez tartozó eloszlás sűrűségfüggvénye λ-ra nézve. Tegyük fel, hogy a $\vartheta \mapsto f_\vartheta(x)$ likelihood-függvény λ-mm. x-re differenciálható, $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta} f_\vartheta(x) \triangleq f_{/\vartheta}(x)$. Ekkor $\mathbf{P}_\vartheta$-mm. x-re értelmes a loglikelihood-függvény deriváltja – a *likelihood score-függvény* –, $l_{/\vartheta}(x) \triangleq \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\log f_\vartheta(x)$. Az X minta *Fisher-információs mátrixa*

$$I(\vartheta) = I_X(\vartheta) \triangleq \mathbf{E}_\vartheta\Big(\big[l_{/\vartheta}(x)\big]^\top\, l_{/\vartheta}(x)\Big)\ ,$$

amennyiben ez a várható érték véges.

3.14. Definíció. Egy statisztikai mezőre akkor mondjuk, hogy eleget tesz a gyenge regularitási feltételeknek (röviden (R)-nek), ha:

(i) $\vartheta \mapsto \sqrt{f_\vartheta(x)}$ folytonosan differeciálható λ-mm. x-re;

(ii) $I(\vartheta)$ véges, pozitív definit és folytonos ϑ-ban.

3.15. Tétel. *Ha egy statisztikai mezőre teljesülnek a gyenge regularitási feltételek, $T : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^k$ torzítatlan becslése $g(\vartheta)$-nak és $\vartheta \mapsto E_\vartheta\big(\|T\|^2\big)$ lokálisan korlátos, akkor $g(\vartheta)$ folytonosan differenciálható ϑ szerint és a $g(\vartheta) = \int_{\mathcal{X}} T(x) f_\vartheta(x)\lambda(\mathrm{d}x)$ egyenlőségbe „be lehet deriválni", azaz*

$$g_{/\vartheta}(\vartheta) = \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta\big(T(X)\big) \underset{\triangle}{=} \int_{\mathcal{X}} T(x) f_{/\vartheta}(x)\lambda(\mathrm{d}x) = \int_{\mathcal{X}} T(x)\frac{f_{/\vartheta}(x)}{f_\vartheta(x)}\cdot f_\vartheta(x)\lambda(\mathrm{d}x) = \mathbf{E}_\vartheta\big(T(X)\cdot l_{/\vartheta}(X)\big)\ . \quad \square$$

[7] A magyar elnevezés nem igazán szerencsés – w nem valamiféle kockázatot számszerűsít, inkább egy technikai eszköz a becslésekhez.

3.16. Tétel (Lehmann). *Természetes paraméterezésű exponenciális családban tetszőleges rendű bederiválhatóság teljesül. Nem természetes paraméterezés esetén $\gamma(\vartheta)$ szerint lehet tetszőleges rendben bederiválni, így ϑ szerint annyira lehet, amennyire $\gamma(\vartheta)$ folytonosan differenciálható.* $\square$

Teljesüljön a statisztikai mezőre (R), továbbá legyen $T(X)$ lokálisan korlátos szórású, torzítatlan becslése $g(\vartheta)$-nak – ekkor $g(\vartheta)$ folytonosan differenciálható λ-mm. x-re – és válasszuk a rizikófüggvényt a $w(x,\vartheta) = \left[l_{/\vartheta}(x)\right]^\top$ képlet szerint.[8] Ekkor – alkalmazva az előző tételt a T, valamint az azonosan 1 statisztikákra:

$$G(\vartheta) = \mathbf{E}_\vartheta\big(T \cdot l_{/\vartheta}\big) = g_{/\vartheta} \qquad \text{és}$$

$$\mathbf{E}_\vartheta(w)^\top = \mathbf{E}_\vartheta\big(\mathbf{1} \cdot l_{/\vartheta}\big) = \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta(1) = \mathbf{0}_p^\top\,, \qquad \text{utóbbiból}$$

$$B(\vartheta) = \mathbf{\Sigma}_\vartheta\big(w(X,\vartheta)\big) = \mathbf{E}_\vartheta\Big(\left[l_{/\vartheta}(x)\right]^\top l_{/\vartheta}(x)\Big) - \mathbf{E}_\vartheta(w)\,\mathbf{E}_\vartheta(w)^\top = I(\vartheta)\,.$$

3.17. Következmény (Fisher-féle információs határ). Mindezt beírva a Cramér-Rao tétel általános alakjába azt kapjuk, hogy (R) fennállása esetén $g(\vartheta)$ bármely T lokálisan korlátos szórású, torzítatlan becslésére $\mathbf{\Sigma}_\vartheta(T) \geq g_{/\vartheta} \cdot I(\vartheta)^{-1} \cdot g_{/\vartheta}^\top$. Ez a *Fisher-információs határ*.

3.18. Megjegyzés. Amennyiben az $I(\vartheta) = \mathbf{E}_\vartheta\big(l_{/\vartheta}^\top l_{/\vartheta}\big)$ várható érték képletébe is be lehet deriválni, akkor a Fisher-információ megkapható $\mathbf{E}_\vartheta\big(-(l_{/\vartheta})_{/\vartheta}^\top\big)$ alakban is. A $j_\vartheta(x) \triangleq -(l_{/\vartheta}(x))_{/\vartheta}^\top$ valószínűségi változó a *megfigyelhető Fisher-információ*.

3.19. Tétel (egyenlőség az információs határnál). *Tegyük fel, hogy $\Theta \subseteq \mathbb{R}^p$ nyílt, összefüggő tartomány, $\operatorname{rk} g_{/\vartheta} = p \quad \big(\forall\vartheta \in \Theta\big)$, valamint a g várható értékű T statisztikára a Cramér-Rao egyenlőtlenség éles $w(x,\vartheta) = l_{/\vartheta}(x)$ esetén:*

$$\mathbf{\Sigma}_\vartheta(T) = g_{/\vartheta} \cdot I(\vartheta)^{-1} \cdot g_{/\vartheta}^\top \qquad \big(\forall\vartheta \in \Theta\big)\,.$$

Ekkor az eloszláscsalád k paraméterű exponenciális és T a kitevőben szereplő statisztika, valamint $\gamma(\vartheta)$ és $\beta(\vartheta)$ folytonosan differenciálható függvények és $\operatorname{rk}\gamma_{/\vartheta} = p$.

Az egyenlőség további ekvivalens feltétele – a regularitási kikötések mellett –, hogy a likelihood-score minden rögzített x-re $g(\vartheta)$ affin függvénye. $\square$

[8] Így az l és p dimenziók megegyeznek.

4. Kvantum Fisher-információ

Ebben a szakaszban a klasszikus statisztika Fisher-információs határának megfelelő kvantumos becsléshez jutunk el, ami intuitívan az állapotcsalád egy eleménél a paraméterre nyerhető információ mennyiségére vonatkozó korlátot jelent.

A teljesség és elégségesség fogalma azt ragadja meg, hogy egy kiválasztott mérés illetve műszer milyen mértékben őrzi meg az állapotban rejlő információt, illetve azt hogyan osztja szét a mérési eredmény eloszlása és a posterior állapot között. E megközelítésben tematikusan közel állnak a Fisher-információ témaköréhez. A klasszikus és kvantumos fogalmak közti kapcsolat értelmezésében hasznos lehet 1.3 táblázata.

Az exponenciális eloszláscsaládok rövid tárgyalása – fizika modellekben való gyakori megjelenésük mellett – azért is érdekes számunkra, mert az információs határ elérhetősége speciális exponenciális családokhoz kötődik.

4.1. Kvantum teljesség és elégségesség

E szakaszban $\mathcal{S}$ jelentsen egy $\{S_\vartheta \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}) | \vartheta \in \Theta\}$ paraméterezett állapot-családot, $\mathcal{M}$ és M pedig egy $\mathcal{H} \rightsquigarrow (\mathcal{X}, \mathcal{A})$ műszert/mérést. A ϑ paraméterhez tartozó kimeneteli eloszlást illetve mérés utáni állapotot jelölje $\mathbf{P}_\vartheta(\mathrm{d}x)$ és $\sigma(\vartheta|x)$.

4.1. Definíció. Az $\mathcal{M}$ kvantum-műszer *teljes* az $\mathcal{S}$ paraméterezett családra nézve, ha minden $\vartheta \in \Theta$-ra és $\mathbf{P}_S(\mathrm{d}x)$-mm. x-re a $\sigma(x;\vartheta)$ mérés utáni állapot nem függ ϑ-tól. *Globálisan teljes*,[1] ha minden paraméterezett állapot-családra teljes.

4.2. Definíció (elégségesség mérésekre). Legyen $M' = M \circ T^{-1}$ az M mérés elmosása. Ez *klasszikusan elégséges M-re* az $\mathcal{S}$ családban, ha az M lehetséges kimeneteli eloszlásaiból alkotott $\left\{\mathbf{P}^M_{S(\vartheta)}(\,\cdot\,)\right\}$ statisztikai mezőben T elégséges statisztika az ismeretlen eloszlásra,[2] azaz ha $\mathbf{P}^M_{S(\vartheta)} \not\equiv \mathbf{P}^M_{S(\vartheta^*)}(\,\cdot\,)$ esetén $\mathbf{P}^{M'}_{S(\vartheta)}(\,\cdot\,) \not\equiv \mathbf{P}^{M'}_{S(\vartheta^*)}$.

4.3. Definíció. Az $\mathcal{S}$ és $\{S'_\vartheta \in \mathfrak{S}(\mathcal{K}) | \vartheta \in \Theta\}$ parametrikus családok *következtetés szempontjából ekvivalensek*, ha ugyanazokat a „klasszikus" parametrikus eloszláscsaládokat adhatják ki mérések kimenetére, azaz minden $M : \mathcal{H} \rightsquigarrow \mathcal{X}$ méréshez létezik $N : \mathcal{K} \rightsquigarrow \mathcal{X}$ mérés, amelyre

$$\mathbf{P}^M_{S_\vartheta} \equiv \mathbf{P}^N_{S'_\vartheta} \qquad (\forall \vartheta \in \Theta)$$

és viszont.

4.4. Definíció (elégségesség műszerekre). Az $\mathcal{S}$ paraméterezett családban az $\mathcal{M}$ műszerre nézve *(kvantum értelemben) elégséges* annak a $T : (\mathcal{X}, \mathcal{A}) \to (\mathcal{X}', \mathcal{A}')$ statisztikával képzett $\mathcal{M}'$ elmosása, ha

(i) A megfelelő $M'(\,\cdot\,) = \mathcal{M}'_{(\,\cdot\,)}(\mathbf{1})$ OProM által definiált mérés klasszikusan elégséges M-re.

(ii) Bármely $x \in \mathcal{X}$ esetén a $\{\sigma_{\mathcal{M}}(x;\vartheta)\}$ és az (1.5) képlet által adott $\{\sigma_{\mathcal{M}'}(T(x)|\vartheta)\}$ posterior családok következtetés szempontjából ekvivalensek.

[1] „completely exhaustive" – a „teljesen teljes" fordítást igyekeztem kerülni

[2] Persze ϑ-ra akkor és csak akkor lesz elégséges, ha a $\mathbf{P}^M_{S(\vartheta)}(\,\cdot\,)$ eloszlások mind különbözőek.

E két feltétel annak formális megfogalmazása, hogy egyrészt az x mérési eredmény $T(x)$ statisztikájának eloszlása nem kevésbé alkalmas a paraméter vizsgálatára, mint maga x, másrészt a mérés utáni állapot pontosan ugyanazon információkat tartalmazza akár x, akár $T(x)$ a feltételként használt kimenetel.[3]

Néhány további kapcsolódó fogalom definícióját, valamint jelentésük – vagy arra vonatkozó sejtés – megfogalmazását adja [BNGJ03].

4.2. Exponenciális és transzformációs kvantum-modellek

4.2.1. Exponenciális családok

4.5. Definíció. *Exponenciális kvantum-modell* alatt olyan $\mathcal{S} = \{S_\vartheta | \vartheta \in \Theta\} \quad (\Theta \subseteq \mathbb{R}^p)$ állapotcsaládot értünk, amelynek elemei

$$S_\vartheta = e^{\beta(\vartheta)} \cdot \exp\left\{\tfrac{1}{2}\textstyle\sum_r \bar{\gamma}_r T_r^*\right\} S_0 \exp\left\{\tfrac{1}{2}\textstyle\sum_k \gamma_r T_r\right\} \qquad \left| \begin{array}{c} \beta : \Theta \to \mathbb{R} \\ \gamma : \Theta \to \mathbb{C}^k \\ S_0 \in \mathfrak{S}(\mathcal{H}) \\ T_1, \dots, T_k : \mathcal{H} \to \mathcal{H} \text{ operátorok} \end{array} \right. \tag{4.1}$$

alakúak.[4] A $\beta(\vartheta)$ függvényt a $\operatorname{Tr} S_\vartheta = 1$ feltétel határozza meg. Három – páronként nem-diszjunkt – speciális típus külön kiemelünk. Mindhárom esetben $T_k \in \mathbb{SA}(\mathcal{H})$, emellett az első esetben felcserélhetőek és az első kettőben nyomoperátorok:[5]

$$S_\vartheta = e^{\beta(\vartheta)} \exp\left\{T_0 + \textstyle\sum_r \vartheta_r T_r\right\} \qquad \text{(mechanikai)}, \tag{4.2}$$

$$S_\vartheta = e^{\beta(\vartheta)} \exp\left\{\tfrac{1}{2}\textstyle\sum \vartheta_r T_r\right\} S_0 \exp\left\{\tfrac{1}{2}\textstyle\sum \vartheta_r T_r\right\} \qquad \text{(szimmetrikus)}, \tag{4.3}$$

$$S_\vartheta = \exp\left\{-\tfrac{1}{2}\mathrm{i}\textstyle\sum \vartheta_r T_r\right\} S_0 \exp\left\{\tfrac{1}{2}\mathrm{i}\textstyle\sum \vartheta_r T_r\right\} \qquad \text{(unitér)}. \tag{4.4}$$

A természetes paraméterezés, természetes paramétertér és teljes család a klasszikus változat analógiájára definiálható.

A mechanikai típushok tartozik a statisztikus kvantummechanika területén számos modellben egyensúlyként megjelenő $e^{\vartheta H} / \operatorname{Tr} e^{\vartheta H} \quad \left(\vartheta = -\frac{1}{kT}\right)$ Gibbs-állapot, ahol H a rendszer Hamilton-operátora, k a Boltzmann-állandó és T a környezet abszolút hőmérséklete.[6]

A szimmetrikus esetet kényelmes kezelhetősége miatt célszerű kiemelni, például a kvantum score számításánál. Amennyiben $S_0, T_1, \dots, T_k$ mind felcserélhetőek, a mechanikus típust kapjuk vissza.

Az unitér típus egyben transzformációs modell is, jellemzőire ezek tárgyalásánál térünk ki.

Sajnálatos módon egy kvantum-exponenciális családra alkalmazott mérés kimenetelének eloszlása általában *nem* eredményez exponenciális családot. Olyan szimmetrikus típusú teljes exponenciális családra azonban, ahol minden T_i felcserélhető, vagyis $\exists X \in \mathbb{SA}(\mathcal{H})\ \exists t_1, \dots, t_r : \mathbb{R} \to \mathbb{R} :\ T_r = t_r(X)$, ezen X mint obszervábilis mérése teljes exponenciális családot eredményez.

[3] Vegyük észre, hogy a mérési eloszlás „veszíthet információt” a T-re történő áttéréskor, de ezek – a klasszikus statisztika elégségességi fogalma szerint – feleslegesek ϑ vizsgálatához.

[4] Nem muszáj ragaszkodnunk ahhoz, hogy a képlet közepén a paraméterezett család S_0 eleme szerepeljen, sőt, akár attól is eltekinthetnénk, hogy nyomoperátor legyen. Viszont nyilvánvaló, hogy a bővebb definícióval is ugyanazokat a családokat kaphatnánk meg, így az egésznek nincs jelentősége.

[5] [BNGJ03] az unitér esetben is megköveteli a korlátosságot. Mivel a gyakorlati példák jelentős részénél (ld. pl. [Hol82]) lényegében önadjungált operátorokra van szükség és a definíció ezekkel is értelmes, e megkötést elhagyjuk.

[6] A Gibbs-állapotot gyakran ismert hőmérséklet és a Hamilton-operátort ϑA-val additívan transzformáló külső erőtér/erőhatás mellett vizsgálják, ahol $[H, A] = 0$, így $\exp\{-(H + \vartheta A)/(kT)\} / \operatorname{Tr}(\dots)$ alakú mechanikus exponenciális családot kapunk. A hőmérséklet változását és több ismeretlen hatást megengedve $k > 1$ esetek is előkerülhetnek.

4.2.2. *Transzformációs modellek*

Tegyük fel, hogy a G transzformációcsoport[7] hatása mind a paramétertéren, mind az M mérés kimeneteli terén értelmezett.

4.6. Definíció. Az $(\mathcal{S}, \Theta, G, M)$ rendszert (paraméteres) *kvantum transzformációs modellnek* nevezzük, ha G tranzitívan hat Θ elemein, valamint a kimeneteli eloszlás „konzisztensen" transzformálódik a paraméter transzformációjával, vagyis

$$\operatorname{Tr} S_\vartheta M(A) = \operatorname{Tr} S_{g\vartheta} M(g^{-1}A) \qquad \big(A \in \mathcal{A}, g \in G\big)\,. \tag{4.5}$$

Ekkor a kimeneteli eloszlások $\mathcal{P}$ családja Θ-val és G-vel együtt klasszikus transzformációs modellt alkot.[8]

Ha egy transzformációs modellben a különböző paraméterek különböző állapotokat reprezentálnak, akkor G hatása Θ felett egyben az $\mathcal{S}$-beli állapotokon is megad egy csoporthatást. Fizikai szemopontból azok az igazán érdekes esetek, amikor a kapcsolat a másik irányból indul: adott a $G_{\mathfrak{S}}$ csoport hatása az összes állapoton és a vizsgált $\mathcal{S}$ állapotcsalád egy S állapot orbitja $G_{\mathfrak{S}}$ vagy annak egy részcsoportja szerint. Szokásunkhoz híven megköveteljük a keveréssel való felcserélhetőséget, vagyis $G_{\mathfrak{S}} : \mathfrak{S}(\mathcal{H}) \to \mathfrak{S}(\mathcal{H})$ lineáris. Ez maga után vonja, hogy tiszta állapot képe tiszta állapot, hiszen a tiszta állapotok alkotják $\mathfrak{S}$ extremális határát és a linearitás miatt nem-extremális állapot képe és ősképe szintén nem az. Így $G_{\mathfrak{S}}$ megszorítható a tiszta állapotok halmazára és a megszorítás már egyértelműen meghatározza a teljes hatást. Nem túl erős folytonossági feltételek mellett a tiszta állapotokon ható, az összes állapot halmazára lineárisan kiterjedő transzformáció-csoport visszavezethető az állapotvektorok halmazán – vagyis kiterjesztve $\mathcal{H}$-n – ható unitér transzformáció-csoportra. Ezzel a következő fogalomhoz jutunk:

4.7. Definíció. s A G csoport $\mathcal{H}$ feletti *projektív unitér ábrázolása* olyan $U : G \to \mathfrak{U}(\mathcal{H})$ leképezés, amely fázistól eltekintve művelettartó, azaz

$$U_{gh} = w(g,h) \cdot U_g U_h \qquad \big(g, h \in G:\ \exists w(g,h) \in \mathbb{C},\ |w| = 1\big)\,.$$

Unitér ábrázolás esetén $w \equiv 1$. Legyen adott a $G : \mathcal{X} \to \mathcal{X}$ transzformáció-csoport projektív unitér ábrázolása és a $G : \Theta \to \Theta$ hatást definiáljuk ábrázolásból természetesen adódó $G : \mathfrak{S}(\mathcal{H}) \to \mathfrak{S}(\mathcal{H})$ visszahúzásaként:

$$S_{g\vartheta} = U_g^* S_\vartheta U_g\,.$$

Az $M : \mathcal{H} \rightsquigarrow \mathcal{X}$ mérést ilyen esetben akkor nevezzük *kovariánsnak* avagy *ekvivariánsnak*, ha felcserélhető G-vel:

$$M\big(g^{-1}A\big) = U_g^* M(A) U_g \qquad \big(g \in G,\ A \in \mathcal{A}\big)\,.$$

Műszerek esetében ezen felül még a transzformált állapotban elvégzett mérés transzformált kimeneteli feltételhez tartozó poszterior eloszlásának ekvivarianciáját természetes megkövetelni. Kompaktabb jelölésrendszerünkkel $\mathcal{M}_{[g^{-1}A]}(Y) = U_g^* \mathcal{M}_{[A]}(Y)\, U_g \quad \big(A \in \mathcal{A},\ Y \in \mathbb{SA}(\mathcal{H})\big)$.

A feltételek részletezése nélkül megemlítjük, hogy egy ekvivariáns mérés általában megadható az alábbi, a csoport μ invariáns mértékéhez kapcsolódó alakban:

$$M(A) = \int_{g:g^{-1}x_0 \in A} U_g^* R_0 U_g \mu(\mathrm{d}g) \qquad \big(x_0 \in \mathcal{X},\ \exists R_0 \in \mathbb{SA}(\mathcal{H}):\ \forall A \in \mathcal{A}\big)\,.$$

[7] A hatás folytonosságát, sőt, gyakran magasabbrendű differenciálhatóságát is ki szoktuk kötni. Így G általában Lie-csoport.

[8] A definíció nem is fejez ki ennél többet…

Különösen érdekesek a két modellcsalád közös elemei, az *exponenciális transzformációs kvantum-modellek* – ekkor mind a regularitáshoz, mind a klasszikus transzformációs modellekhez kapcsolódó eredmények relevánsak. A szimmetrikus típusban – és persze a felsorolt típusokon kívül is – találhatóak olyanok, melyek az exponenciális paraméterezéshez valamelyest kapcsolódó csoporthatással transzformációs modellé tehetőek; mi fizikai jelentőségük folytán az unitér exponenciális transzformációs modellekre térünk ki.

A teljesség és a pontosság igénye nélkül – azaz vázlatosan és hiányosan – bemutatjuk, honnan ered e kiemelkedő szerep. A kíváncsi olvasó rendelkezésére áll az elméleti fizika irodalma… A témakör statisztikai megközelítésű, emellett a a szimmetriák és mérések kapcsolatára nagy hangsúlyt fektető tárgyalását adja [Hol82].

A modern fizikai elméletek a tér(idő) Γ szimmetriacsoportjának – mely egy Lie-csoport – megadásával indulnak. A klasszikus mechanika esetében ez a Galilei-csoport, a relativitáselméletben a Lorentz-csoport. A fizikai mennyiségek egyik legalapvetőbb tulajdonsága, hogy hogyan transzformálódnak a szimmetria-csoport hatására, például az x irányú helykoordinátától – bármi legyen is az – elvárjuk, hogy invariáns legyen az y irányú merőleges elmozdulásokra és kovariáns az x irányúakkal. Egy objektum állapotát $(p_i, q_i)_{i=1}^f$ kanonikus koordináták adják meg, e koordinátázás pedig a rögzített szabadságfokon túl az által definiált – persze nem egyértelműen –, hogy eleget kell tegyen a rendszerhez tartozó szimplektikus forma – a Poisson zárójel – segítségével előírt kanonikus felcserélési relációknak. Minden további fizikai mennyiség felírható ezen (p, q) függvényeként. Kiemelendő a $H(p, q)$ Hamilton-függvény, mely az állapot energiáját rendeli a kanonikus koordinátákhoz: az energia-megmaradásnak H és a Poisson-zárójel segítségével felírt differenciális változata alakul majd át a kvantumrendszer időfejlődésének Schrödinger-egyenletévé.

A tér kvantumelmélete a fenti konstrukciót úgy folytatja, hogy egy $\mathcal{H}$ Hilbert tér (P_i, Q_i) sűrűn definiált önadjungált operátorait mint obszervábiliseket felelteti meg a kanonikus mennyiségek mérésének, melyekre a kanonikus felcserélési relációk teljesülését írja elő, melyek Weyl-féle alakja a következp:[9]

$$\left.\begin{aligned} \exp\{\mathrm{i}sQ_k\}\exp\{\mathrm{i}tP_j\} &= \exp\{\mathrm{i}\delta_{jk}st\}\exp\{\mathrm{i}sP_j\}\exp\{\mathrm{i}tQ_k\} \\ \exp\{\mathrm{i}sP_k\}\,e\,\{\mathrm{i}tP_j\} &= \exp\{\mathrm{i}sP_j\}\exp\{\mathrm{i}tP_k\} \\ \exp\{\mathrm{i}sQ_k\}\,e\,\{\mathrm{i}tQ_j\} &= \exp\{\mathrm{i}sQ_j\}\exp\{\mathrm{i}tQ_k\}\ . \end{aligned}\right| \quad (s, t \in \mathbb{R})$$

Továbbá a Γ csoport egy olyan projektív unitér ábrázolását írja elő a $\mathcal{H}$ Hilbert-téren, melynél a P_i és Q_i obszervábilisek mérések eredménye az állapotok transzformációira a p_i és q_i kanonikus koordináták szimmetria-tulajdonságait reprezentálja. A további $f(p, q)$ mennyiségeknek megfelelő obszervábilisek a P_i és Q_i operátorokból alkotandóak meg különféle szabályok szerint.[10] A rendszer minden egyes R kanonikus koordinátájához tartozik Γ egy G egyparaméteres részcsoportja, amely az egységelem körül elsőrendben csak azt a koordinátát módosítja. Tekintve az S_0 tiszta állapot G-orbitját egy egyparaméteres, unitér típusú exponenciális transzformációs modellt kapunk, amely – legalábbis S_0 körül – az „R fizikai mennyiség értéke ismeretlen" probléma megfelelője, ami szemmel láthatóan nem idegen a mérés és becslés témakörétől. Egyetlen valós számmal jellemzett fizikai mennyiségekre a konstrukció lényegében ugyanígy működik.

Sok gyakorlati példánál az egyparaméteres részcsoport globálisan is csak egy koordinátára hat.[11] Továbbá felcserélhető obszervábilissel jellemzett mennyiségek esetén a generált többparaméteres részcsoport szerinti orbit hasonló módon – szerencsés esetben globálisan – megfeleltethető az ismeretlen többdimenziós fizikai jellemző esetének.[12]

[9] A Heisenberg-féle változatban $[P_i, Q_i] = \mathrm{i}\mathbf{1}$ és minden más kommutátor $\mathbf{0}$. Ez szigorúan véve teljesíthetetlen, csak $[P_i, Q_i] \subsetneq \mathrm{i}\mathbf{1}$ lehetséges. Az értelmezési tartományokra mindenféle kikötéseket kellene megszabnunk, míg a Weyl-féle alaknál ettől mentesülünk. A Weyl-féle reláció emellett erősebb a Heisenberg-félénél akkor is, ha a kommutátor sűrűn definiált.

[10] A felépítés fő problémája persze az, hogy az értelmezési tartomány sűrű, a megfelelő operátor pedig lényegében önadjungált maradjon.

[11] Pl. a Galilei-csoport esetében a szokásos hely–impulzus paraméterezéssel ez bármely hely- vagy impulzuskoordinátára teljesül.

[12] Nem tiszta állapot orbitjánál az intuitív megfeleltetés az orbit és az egyetlen ismeretlen koordináta esete között alapvetően ellenkező irányú: a tiszta állapotok analógiája alapján ezt a családot kapcsoljuk az ismeretlen mennyiség fogalmához.

Még annyit említünk meg minden alátámasztás nélkül, hogy a G egyparaméteres részcsoport unitér ábrázolánál[13] az infinitezimális generátor a megfelelő mennyiség kanonikus konjugáltjának obszervábilise.

Mivel a felcserélési reláció véges dimenziós téren nem reprezentálható, a fentiekkel – szigorúan véve – persze csak azon esetekben támaszthatjuk alá érdeklődésünket az exponenciális transzformációs modellek irányában, amikor a Hilbert-tér végtelen dimenziós. Viszont az irodalomjegyzék több eleme is ad részletesen kidolgozott, véges dimenziós példákat.

4.3. Paraméterek becslése méréssel

Legyen $\{S_\vartheta | \vartheta \in \Theta \subset \mathbb{R}^n\}$ állapotok egy paraméterezett családja, $M(\mathrm{d}^n\vartheta)$ pedig – ahol persze $\mathrm{d}^n\vartheta = \mathrm{d}\vartheta_1 \cdots \mathrm{d}\vartheta_n$ – Θ-beli értékű mérés.[14] Az egyszerűség kedvéért feltesszük, hogy a második momentumok végesek:

$$\int_\Theta \hat{\vartheta}_j^2 \mathbf{P}_\vartheta(\mathrm{d}^n\hat{\vartheta}) < \infty \qquad \big(\forall\vartheta \in \Theta\big)\,, \tag{4.6}$$

ahol $\mathbf{P}_\vartheta(B) \triangleq \mathbf{P}_{S_\vartheta}^M(B) = \operatorname{Tr} S_\vartheta M(B)$ az M mérés eredményének S_ϑ állapothoz tartozó eloszlása. A mérés *torzítatlan* becslése a ϑ paraméternek, ha

$$\int_\Theta \hat{\vartheta}_j \mathbf{P}_\vartheta(\mathrm{d}^n\hat{\vartheta}) = \vartheta_j \qquad \big(j = 1, \ldots, n;\ \forall\vartheta \in \Theta\big)\,, \tag{4.7}$$

vagyis – lazán fogalmazva – a mérés eredménye és a paraméter valódi értéke közti eltérés, a mérési hiba, nem-szisztematikus. Használni fogjuk még a fenti feltétel differenciális változatát:

$$\frac{\partial}{\partial\vartheta_k} \int_\Theta \hat{\vartheta}_j \mathbf{P}_\vartheta(\mathrm{d}^n\hat{\vartheta}) = \delta_{jk} \qquad \big(j, k = 1, \ldots, n;\ \forall\vartheta \in \Theta\big)\,,$$

avagy formálisan:

$$\int_\Theta \hat{\vartheta}_j \frac{\partial \mathbf{P}_\vartheta}{\partial\vartheta_k}(\mathrm{d}^n\hat{\vartheta}) = \delta_{jk} \qquad \big(j, k = 1, \ldots, n;\ \forall\vartheta \in \Theta\big)\,. \tag{4.8}$$

Az utóbbi alakot fogjuk gyakrabban használni, a pontos értelmezést (és hogy milyen feltételek mellett ekvivalens az elsővel) későbbre halasztjuk. Azt, hogy a (4.6), (4.7) és (4.8) feltételek teljesülnek valamely $\vartheta \in \Theta$ pontban, az M mérés ϑ-beli *lokális torzítatlanságának* nevezzük.

4.4. Cramér–Rao tétel egydimenziós állapotcsaládra

Tegyük fel, hogy az $\mathcal{S} = \{S_\vartheta\}$ egyparaméteres állapotcsalád eleget tesz a következő regularitási feltételeknek:

(i) $\mathcal{S} : \Theta \to \mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$ differenciálható leképezés.

Jelöljük a $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta} S_\vartheta$ deriváltat $S_{/\vartheta}$-val. Ekkor a 2.2 tétel szerint

$$\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta(X) = \operatorname{Tr} \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta} S_\vartheta \cdot X \triangleq \operatorname{Tr} S_{/\vartheta} X \qquad \big(X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\big)\,. \tag{4.9}$$

Tegyük még fel, hogy

[13] Ismert, hogy $(\mathbb{R}, +)$ minden projektív unitér ábrázolása pusztán a fázis változtatásával unitérré tehető, amely módosítás persze nem módosítja az obszervábilisekre és állapot-operátorokra gyakorolt hatást. Így feltehetjük, hogy az ábrázolás G-re megszorítva unitér.

[14] Persze megeshet, hogy $\operatorname{supp} \mathbf{P}_\vartheta \not\subseteq \Theta$: ilyenkor a mérés eredménye véletlenül kilóghat a paraméterhalmazból. „Elég szép" Θ (mondjuk konvex tartomány) esetén ez általában elkerülhető, különösen lokális vizsgálódásoknál. Mi elsősorban ezekre fogunk szorítkozni, így inkább kizárjuk a kilógást. A lényeget nem befolyásolja, a jelölések és számolások pedig áttekinthetőbbek ezáltal.

(ii) A korlátos X operátorokra a (4.9) képlet szerint ható lineáris funkcionál $\forall\vartheta \in \Theta$ esetén folytonosan kiterjeszthető az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S_\vartheta)$ térre, azaz $\exists c \in \mathbb{R}$:

$$\left|\operatorname{Tr} S_{/\vartheta} X\right|^2 \leq c \cdot \operatorname{Tr} S_\vartheta X^2 \qquad \big(\forall X \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})\big) .$$

A Riesz-reprezentáció alapján található[15] $S_{//\vartheta} \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S_\vartheta)$, amelyre $\operatorname{Tr} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta} S_\vartheta \cdot X = \big(S_{//\vartheta}\big|X\big)_\vartheta$, ha $X \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$. Ezt átírva a (2.5) képlet szerint és kihasználva, hogy a $\{\operatorname{Tr}(\,\cdot\,)X \,|\, X \in \mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})\}$ funkcionálok szeparálják a $\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})$ Banach-teret,

$$S_{/\vartheta} = S_\vartheta \circ S_{//\vartheta} \equiv \tfrac{1}{2}\big(S_\vartheta S_{//\vartheta} + S_{//\vartheta} S_\vartheta\big) . \tag{4.10}$$

4.8. Definíció. A (4.10) összefüggésnek eleget tevő $S_{//\vartheta} \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S_\vartheta)$ operátort az $\mathcal{S}$ állapotcsalád S_ϑ pontbeli *szimmetrikus logaritmikus deriváltjának*, avagy *kvantum score-operátorának* nevezzük. Ennek egy egyszerű, de gyakran hasznosnak bizonyuló tulajdonsága a következő:

$$\big(\mathbf{1}\big|S_{//\vartheta}\big)_S = \mathbf{E}_\vartheta\big(S_{//\vartheta}\big) = \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta(\mathbf{1}) = 0 . \tag{4.11}$$

A következő állításban igazoljuk a score-operátorra vonatkozó legfontosabb összefüggést:

$$\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta(X_M) = \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}(X_M|I)_\vartheta = \big(X_M\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta \qquad \big(X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\big) . \tag{4.12}$$

Emellett a képlet érvényességéhez szükséges – nem túl erős – simasági feltételeket is megadjuk.

Rögzítsünk most egy $M : \mathcal{H} \rightsquigarrow \mathbb{R}$ véges várható értékű mérést.

Azon túl, hogy véges várható értéket feltételezünk róla, kössük ki, hogy $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\big(\mathbf{E}_\vartheta(M)\big)$ képletébe be lehet deriválni, azaz

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\int x\mathbf{P}_\vartheta(\mathrm{d}x) = \int x \operatorname{Tr} S_{/\vartheta} M(\mathrm{d}x) , \tag{4.13}$$

ahol $\operatorname{Tr} S_{/\vartheta} M(\,\cdot\,)$ (véges totális variációjú, hisz $S_{/\vartheta} \in \mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$) σ-additív halmazfüggvény, más néven korlátos előjeles mérték.

4.9. Állítás. *Az $\mathcal{S}$ állapotcsalád feleljen meg a fenti (i) és (ii) feltételeknek, valamint az M mérés a ϑ pontban tegyen eleget a* (4.13) *összefüggésnek. Ekkor*

$$\mathbf{D}_\vartheta(M)\,\mathbf{D}_\vartheta\big(S_{//\vartheta}\big) \geq \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta(M)\right]^2 . \tag{4.14}$$

A (4.9) képlet és $S_{//\vartheta}$ definíciója szerint

$$\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta(X) = \big(X\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta \qquad \big(\forall X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\big) .$$

Ezt szeretnénk véges második momentumú $M : \mathcal{H} \rightsquigarrow (\mathcal{X}, \mathcal{A})$ mérésekre kiterjeszteni. X helyére az $M(A)$ $\big(A \in \mathcal{A}\big)$ operátort helyettesítve

$$\operatorname{Tr} S_{/\vartheta} M(A) = \big(M(A)\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta .$$

Legyen most

$$X_M = {}^{\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)}\!\!\int x M(\mathrm{d}x) .$$

[15] Mégpedig $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S_\vartheta)$ elemeként egyértelműen, azaz az operátor $\mathcal{R}(S_\vartheta)$ elemein – hű állapot esetén az egész $\mathcal{H}$ téren – egyértelműen definiált. Nem hű állapotra előírhatjuk, hogy $\mathcal{R}(S_\vartheta)$ ortogonális komplementerén azonosan 0 legyen, így már egyértelmű.

Az integrál olyan közelítő összegek $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$-beli limesze, melyek tagjaiban alkalmazható $\operatorname{Tr} S_{/\vartheta} M(A)$ képlete és az $\big(\cdot\,\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta$ funkcionál e térben folytonos, így az integrálás és a skaláris szorzás felcserélhető és

$$\big(X_M\,\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta = \int x\,\big(M(\mathrm{d}x)\,\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta = \int x\,\operatorname{Tr} S_{/\vartheta} M(\mathrm{d}x)\,.$$

A bederiválhatósági feltétel szerint

$$\big(X_M\,\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta = \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{E}_\vartheta(M) = \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}(X_M\,|I)_\vartheta\ .$$

Felírva a (2.10) képletet

$$\mathbf{D}^2_\vartheta(M) \geq \big(X_M - \mathbf{E}_\vartheta(M)\,\big|X_M - \mathbf{E}_\vartheta(M)\,\big)_\vartheta$$

A Cauchy-egyenlőtlenség és (4.11) alapján

$$\big(X_M - \mathbf{E}_\vartheta(M)\,\big|X_M - \mathbf{E}_\vartheta(M)\,\big)_\vartheta \cdot \big(S_{//\vartheta}\,\big|S_{//\vartheta}\big)_\vartheta \geq \big(X_M - \mathbf{E}_\vartheta(M)\,\big|S_{//\vartheta}\big)^2_\vartheta = \big(X_M\,\big|S_{//\vartheta}\big)^2_\vartheta\ ,$$

amely az előző két összefüggéssel kiegészítve épp a bizonyítandó állítást adja. □

4.10. Következmény. *Amennyiben az előbbi állításban az M mérés ϑ-ban lokálisan torzítatlan becslés a paraméterre, úgy*

$$\mathbf{D}^2_\vartheta(M) \geq \mathbf{D}^2_\vartheta\big(S_{//\vartheta}\big)^{-1}\ . \tag{4.15}$$

Sőt, ehhez elegendő az alábbi – a bizonyítás alapján a lokális torzítatlanságból következő – tulajdonság is:

$$\big(S_{//\vartheta}\big|X_M\big)_\vartheta = 1 \tag{4.16}$$

4.11. Definíció. A következményben megjelenő $I_Q(\vartheta) \triangleq \mathbf{D}^2_\vartheta\big(S_{//\vartheta}\big)$ mennyiséget[16] az $\mathcal{S}$ családhoz tartozó *kvantum Fisher-információnak* nevezzük.

A következőkben általában nem a bederiválhatóságot fogjuk ellenőrizni, inkább a (4.16) képlettel vagy ahhoz hasonlóakkal dolgozunk. Mindemellett megadjuk (4.13) egy elégséges feltételét, melynek segítségével a torzítatlanságból a lokális torzítatlanságra következtethetünk.

4.12. Állítás. *Az $\mathcal{S}$ egyparaméteres állapotcsalád tegyen eleget a 4.9 állítás (i) feltételének a ϑ értékek egy nyílt intervallumán és itt legyen $S_{/\vartheta}$ egyenletesen majorálható $\mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$-ban, azaz alkalmas $T \in \mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$ pozitív nyomoperátorra $-T \leq S_{/\vartheta} \leq T$. Az M mérés legyen még akkor is abszolút integrálható, ha az állapot helyére T-t írjuk, azaz $\int |\hat\vartheta|\operatorname{Tr} TM(\mathrm{d}\hat\vartheta) < \infty$. Ekkor (4.13) az intervallum minden ϑ elemére fennáll.*

Jelölje a $\operatorname{Tr} TM(\cdot)$ mértéket $\nu(\cdot)$. A Lagrange-féle középérték-tételt az $S_{/\vartheta}$-ra adott univerzális majorálással összevetve

$$\left|\frac{\mathbf{P}_{\vartheta+\Delta\vartheta}(A) - \mathbf{P}_\vartheta(A)}{\Delta\vartheta}\right| \leq \sup_{\vartheta\ldots\vartheta+\Delta\vartheta} \operatorname{Tr} S_{/\vartheta} M(A) \leq \operatorname{Tr} TM(A) = \nu(A) \qquad \big(A \in \mathcal{A} = \mathcal{B}(\Theta)\big)\,.$$

Így $\big|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\mathbf{P}_\vartheta(A)\big| \leq \nu(A)$, az $\int \hat\vartheta P_{/\vartheta}\mathrm{d}\hat\vartheta$ integrál pedig jóldefiniált és konvergens, hiszen a feltételben szereplő konvergens integrál majorálja. Tetszőleges c korlát alatt

$$\int_{|\hat\vartheta|\leq c} \hat\vartheta\, P_{/\vartheta}(\mathrm{d}\hat\vartheta) = \operatorname{Tr}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\int_{|\hat\vartheta|\leq c} \hat\vartheta\, M(\mathrm{d}\hat\vartheta) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\vartheta}\int_{|\hat\vartheta|\leq c} \hat\vartheta\, \mathbf{P}_\vartheta(\mathrm{d}\hat\vartheta)\ ,$$

hiszen az operációk felcserélése a korlátosság miatt nem okoz gondot. A nagy értékeken pedig

$$\left|\frac{1}{\Delta\vartheta}\Big[\int_{|\hat\vartheta|>c} \hat\vartheta\, \mathbf{P}_{\vartheta+\Delta\vartheta}(\mathrm{d}\hat\vartheta) - \int_{|\hat\vartheta|>c} \hat\vartheta\, \mathbf{P}_\vartheta(\mathrm{d}\hat\vartheta)\Big] - \int_{|\hat\vartheta|>c} \hat\vartheta\, P_{/\vartheta}(\mathrm{d}\vartheta)\right| \leq \int_{|\hat\vartheta|>c} |\hat\vartheta|\ \nu(\mathrm{d}\hat\vartheta)\,.$$

A jobb oldal egy konvergens integrál maradéktagja, azaz a bal oldal $c \to \infty$ esetén ϑ-ban egyenletesen konvergál 0-hoz, ami igazolja az állítást. □

[16] A $_Q$ alsó indexet csak akkor fogjuk kitenni, ha hiánya értelemzavaró lenne.

4.4.1. A Fisher-információ alapvető tulajdonságai

Tegyük most fel, hogy az M mérés abszolút folytonos: $M(\mathrm{d}x) = m(x)\lambda(\mathrm{d}x)$. Ekkor a mérés kimenetele is abszolút folytonos $f_\vartheta(x) = \operatorname{Tr} S_\vartheta m(x)$ sűrűségfüggvénnyel, a log-likelihood függvény

$$l_\vartheta(x) = \log \operatorname{Tr}\big(S_\vartheta m(x)\big) \ ,$$

deriváltja

$$\begin{aligned} l_{/\vartheta}(x) &= f_\vartheta^{-1}(x) \operatorname{Tr}\big(S_{/\vartheta} \cdot m(x)\big) = f_\vartheta^{-1}(x)\, \tfrac{1}{2} \operatorname{Tr}\big((S_\vartheta S_{//\vartheta} + S_{//\vartheta} S_\vartheta) \cdot m(x)\big) \\ &= f_\vartheta^{-1}(x) \operatorname{Re} \operatorname{Tr}\big(S_\vartheta S_{//\vartheta} \cdot m(x)\big) \ . \end{aligned}$$

A (4.11) képletet most a sűrűségfüggvény használatával is beláthatjuk:

$$\begin{aligned} 0 = \mathbf{E}_\vartheta\big(l_{/\vartheta}(x)\big) = \operatorname{Re} \int_{\mathcal{X}} f_\vartheta(x)\, f_\vartheta^{-1}(x) \operatorname{Tr}\big(S_\vartheta S_{//\vartheta} \cdot m(x)\big) \lambda(\mathrm{d}x) = \operatorname{Re} \operatorname{Tr} \left[S_\vartheta S_{//\vartheta} \int_{\mathcal{X}} m(x) \lambda(\mathrm{d}x) \right] \\ 0 = \operatorname{Re} \operatorname{Tr} S_\vartheta S_{//\vartheta} \mathbf{1} = \operatorname{Tr} S_\vartheta S_{//\vartheta} \ . \end{aligned} \tag{4.17}$$

Differenciálva az iménti egyenlőséget és feltéve, hogy az integrálba be lehet deriválni, némi számolás után

$$I(\vartheta) = -\operatorname{Tr} S_\vartheta S_{//\vartheta/\vartheta} = \mathbf{E}_\vartheta\big(S_{//\vartheta\vartheta}\big)$$

adódik. Az egydimenziós klasszikus eset $j(\vartheta) = l_{/\vartheta/\vartheta}$ megfigyelhető Fisher-információjának analógiájára $J(\vartheta) \triangleq S_{//\vartheta/\vartheta}$ a *(Fisher-) információs obszervábilis*, amelyre tehát

$$I(\vartheta) = \mathbf{E}_\vartheta(J(\vartheta)) \ .$$

A Fisher-információ független mintákon teljesülő additivitásának az

$$S_\vartheta = S_\vartheta^{(1)} \otimes S_\vartheta^{(2)} \otimes \ldots \otimes S_\vartheta^{(n)}$$

állapotcsalád Fisher-információjának képlete felel meg, amely valóban

$$I_{\otimes S^{(i)}}(\vartheta) = \sum\nolimits_i I_{S^{(i)}}(\vartheta) \ .$$

Speciálisan ha a modell n azonosan preparált független rendszerből áll, akkor

$$I_{S^{\otimes n}}(\vartheta) = n \cdot I_S(\vartheta) \ .$$

4.13. Definíció. Az M méréshez tartozó *klasszikus (várható) Fisher-információ* a kimenetel eloszlásának Fisher-információja, azaz

$$\begin{aligned} i(\vartheta; M) &\triangleq I\big(\vartheta; \{\mathbf{P}_\vartheta^M\}\big) = \mathbf{E}_\vartheta\big(l_{/\vartheta}(x)^2\big) \\ &= \int_{\mathcal{X}} f_\vartheta^{-1}(x) \left[\operatorname{Re} \operatorname{Tr}\big(S_\vartheta S_{//\vartheta} \cdot m(x)\big) \right]^2 \lambda(\mathrm{d}x) \ . \end{aligned} \tag{4.18}$$

Az $i(\vartheta; M)$ klasszikus Fisher-információ tehát az M mérés x kimeneteléhez tartozó likelihood-score mérésének varianciája avagy – ha akarjuk – négyzetének várható értéke. A korábban definiált kvantum Fisher-információ pedig a kvantum-score obszervábilis varianciája és (4.11) szerint egyben négyzetének várható értéke.

A mérés által elérhető klasszikus Fisher-információ és a kvantum Fisher-információ viszonyát [BC94] tétele adja:

4.14. Tétel (Braunstein–Caves információs határ). *Az $\mathcal{S} = \{S_\vartheta\}$ differenciálható és a bederiválhatósági feltételnek eleget tevő egyparaméteres állapotcsaládban az $M(\mathrm{d}x) = m(x)\lambda(\mathrm{d}x)$ abszolút folytonos mérés klasszikus Fisher-információja nem lehet több a kvantum Fisher-információnál:*

$$i(\vartheta; M) \leq I_Q(\vartheta)\,. \tag{4.19}$$

Legyen $\mathcal{X}_+ = \{x | f_\vartheta(x) > 0\}$, $\mathcal{X}_0 = \{x | f_\vartheta(x) = 0\}$, $A(x) = m(x)^{1/2} S_{//\vartheta} S_\vartheta^{1/2}$, $B = m(x)^{1/2} S_\vartheta^{1/2}$. Ekkor persze $f_\vartheta(x) = \operatorname{Tr} B^* B$.

$$i(\vartheta; M) = \int_{\mathcal{X}_+} f_\vartheta^{-1}(x) \left[\operatorname{Re}\operatorname{Tr}\big(S_\vartheta S_{//\vartheta} \cdot m(x)\big)\right]^2 \lambda(\mathrm{d}x) \qquad \leq \dots$$

A $z = \operatorname{Tr}(\dots)$ komplex számra alkalmazhatjuk a $\operatorname{Re}(z^2) \leq |z|^2$ egyenlőtlenséget.

$$\dots \leq \int_{\mathcal{X}_+} f_\vartheta^{-1}(x) \left|\operatorname{Tr}\big(S_\vartheta S_{//\vartheta} \cdot m(x)\big)\right|^2 \lambda(\mathrm{d}x) \qquad = \dots$$

Használjuk ki a szorzat nyomának ciklikus invarianciáját, valamint hogy önadjungáltak szorzatának adjungáltja a fordított sorrendű szorzat: $S_\vartheta^{1/2} m(x)^{1/2} = \big(m(x)^{1/2} S_\vartheta^{1/2}\big)^*$.

$$\dots = \int_{\mathcal{X}_+} \big(\operatorname{Tr} S_\vartheta m(x)\big)^{-1} \cdot \left|\operatorname{Tr}\Big[\big(m(x)^{1/2} S_\vartheta^{1/2}\big)^* \big(m(x)^{1/2} S_{//\vartheta} S_\vartheta^{1/2}\big)\Big]\right|^2 \lambda \mathrm{d}x \leq$$

Az első tényező $\big(\operatorname{Tr} B^* B\big)^{-1}$, a második $\big(\operatorname{Tr} B^* A\big)^2$. A Hilbert–Schmidt szorzat Cauchy-egyenlőtlensége szerint ezt majorálja $\operatorname{Tr} A^* A$.

$$\dots \leq \int_{\mathcal{X}_+} \operatorname{Tr}\big(m(x) S_{//\vartheta} S_\vartheta S_{//\vartheta}\big) \lambda(\mathrm{d}x) \leq \operatorname{Tr}\left[S_{//\vartheta} S_\vartheta S_{//\vartheta} \int_{\mathcal{X}} m(x) \lambda(\mathrm{d}x)\right] \qquad =$$

$$\dots = \operatorname{Tr} S_\vartheta S_{//\vartheta}^2 = I_Q(\vartheta)\,. \quad \square$$

Így a ϑ egydimenziós paramétert torzítatlanul becslő mérés szóródására az alábbi határokat adhatjuk:

$$\mathbf{D}_\vartheta^2(M) \geq i(\vartheta; M)^{-1} \qquad\qquad i(\vartheta; M) \leq I(\vartheta)$$

$$\mathbf{D}_\vartheta^2(M) \geq I(\vartheta)^{-1}$$

Az első a klasszikus Fisher-információs határ, a második a Braunstein–Caves határ, az alsó pedig a kvantum Fisher-információs határ,[17] melyre immár két bizonyításunk is van.

Térjünk most rá az elérhetőség feltételére.

Ahhoz, hogy a bizonyítás mindhárom lépésénél egyenlőség teljesüljön, az alábbiaknak kell fennállniuk:

(i) $\operatorname{Im}\operatorname{Tr}\big(A(x)^* B(x)\big) = 0 \qquad \big(\forall^{(\lambda)} x\big)$;

(ii) $\alpha(x) A(x) + \beta(x) B(x) = 0 \qquad \big(\forall^{(\lambda)} x\, \exists \alpha(x), \beta(x) \in \mathbb{C},\ \alpha(x)\beta(x) \neq 0\big)$;

(iii) $\displaystyle\int_{\mathcal{X}_0} \operatorname{Tr}\big(A(x)^* A(x)\big) \lambda(\mathrm{d}x) = 0$.

Amennyiben egy $r(x)$ valós függvényre $A(x) = r(x) B(x)$ (persze λ-mm.), úgy az (i) nyom bizonyosan valós és persze (ii) is teljesül. Ráadásul $\operatorname{Tr} A(x)^* A(x) = r(x)^2 f_\vartheta(x)$ integrálja nulla az $\mathcal{X}_0$ halmazon, összefoglalva $i(\vartheta; M) = I(\vartheta)$.

Az ellenkező irányhoz tegyük fel, hogy a három összefüggés valóban teljesül. Az $\mathcal{X}_+$ halmazon $B(x)$ nem lehet 0, hiszen $\operatorname{Tr} B(x)^* B(x) = f_\vartheta(x) \neq 0$, ezért itt (ii)-ben $\alpha(x) \neq 0$ és $A(x) = \frac{\beta(x)}{\alpha(x)} B(x)$, ám (i) miatt az együttható csak valós lehet. $\mathcal{X}_0$ elemein $A(x)$ a (iii) feltétel miatt eleve csak λ-nullmértékben térhet el 0-tól.

Azaz az egyenlőség ekvivalens feltétele:

[17] Az egyébként alapműnek számító [Hel76] könyvre utalva néha Helstrom-féle információs határ néven szerepel.

$$S_\vartheta^{1/2} S_{//\vartheta} m(x)^{1/2} = r(x) S_\vartheta^{1/2} m(x)^{1/2} \qquad \left(\forall^{(\lambda)} x,\, r : \mathcal{X} \to \mathbb{R}\right) . \tag{4.20}$$

Ha az $S_{//\vartheta}$ kvantum score operátornak nem-egyértelműség esetén mindig azt a változatát választjuk, amelynek képtere $\mathcal{H}_S \triangleq \mathcal{R}(S)$ része, akkor ez a feltétel azt fejezi ki, hogy minden $M(A) = \int_A m(x)\lambda(\mathrm{d}x)$ operátor spektrálmértéke felcserélhető $S_{//\vartheta}$ spektrálmértékével. Amennyiben $S_{//\vartheta}$ spektruma egyszeres (ekkor S_ϑ magja legfeljebb egydimenziós), akkor ez azt jelenti, hogy az M-hez tartozó oszervábilis kifejezhető $S_{//\vartheta}$ függvényeként. Jó közelítéssel azt mondhatjuk hát, hogy ha S hű, akkor a Braunstein–Caves határt csak a kvantum score függvényének mérése érheti el. Globálisan eleve csak akkor lehet elérhető a határ, ha minden $S_{//\vartheta}$ spektrálmértéke felcserélhető. Bizonyos regularitási feltételek fennállása esetére [BNGJ03] pontosan karakterizálja a globális elérhetőséget:

4.15. Tétel (Braunstein–Caves határ globális elérhetősége.). *Tegyük fel, hogy az $\mathcal{S} = \{S_\vartheta\}$ egyparaméteres állapotcsalád minden eleme hű, a kvantum score a paraméter sima függvénye és legalább egy ϑ paraméterre egyszeres spektrumú. Legyen továbbá az M mérés olyan, hogy minden ϑ paraméterre $i(\vartheta; M) = I(\vartheta)$. Ekkor létezik olyan X obszervábilis is, melynek mérése szintén globálisan eléri a Braunstein–Caves határt, az állapotcsalád pedig*

$$S_\vartheta = e^{\beta(\vartheta)} \exp\left\{\tfrac{1}{2} F_\vartheta(X)\right\} S_0 \exp\left\{\tfrac{1}{2} F_\vartheta(X)\right\} , \tag{4.21}$$

ahol az $F : \Theta \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ valós függvényre $S_{//\vartheta} = F_\vartheta(X) - \operatorname{Tr} S_\vartheta F_{/\vartheta}(X)$, β pedig a nyom logaritmusát normalizálja.

Megfordítva, amennyiben a modell valamely X obszervábilisra és F függvényre ilyen alakú, akkor X mérése egyenletesen eléri a Braunstein–Caves határt.

Legyen $S_{//\vartheta}$ egyszeres spektrumú ϑ_0-ban. M minden finomítása is eléri az információs határt,[18] így feltehető, hogy M értékkészletében $S_{//\vartheta}(\vartheta_0)$ minden egyes sajátaltere projektorának valamely konstansszorosa szerepel.[19] A kvantum score minden más paraméter-értéknél is felcserélhető M-mel, vagyis felcserélhető $S_{//\vartheta}$-val. Következésképp létezik olyan X obszervábilis, melyre $S_{//\vartheta} = f_\vartheta(X)$ teljesül az egész Θ felett. Legyen $F_\vartheta(X) = \int_{\vartheta_0}^{\vartheta} f_\vartheta(X)\mathrm{d}\vartheta$ és $S_0 = S(\vartheta_0)$. Az $S_{/\vartheta} = S_\vartheta \circ S_{//\vartheta}$ összefüggést[20] tekinthetjük $S_{//\vartheta}$ és $S(\vartheta 0)$ ismeretében $\S_\vartheta$-ra vonatkozó differenciál-egyenletnek. A simasági feltételek miatt a megoldás egyértelmű, a megadott képlet pedig helyes megoldást szolgáltat.

A megfordításhoz ugyanezeket kell fordított irányban meggondolni. □

4.16. Tétel (Kvantum Fisher-információs határ globális elérhetősége.). *Tegyük fel, hogy teljesülnek az előző tétel pozitivitási és regularitási feltételei, valamint az M mérés kimenetelének t statisztikája torzítatlan becslése a ϑ paraméternek és a $\mathbf{D}^2(t) \geq I_Q(\vartheta)^{-1}$ határ egyenlőségre teljesül. Ekkor az állapotcsalád valamely T obszervábilisre*

$$S_\vartheta = \exp\{\beta(\vartheta)\} \exp\left\{\tfrac{1}{2}\vartheta T\right\} S_0 \exp\left\{\tfrac{1}{2}\vartheta T\right\}$$

alakú, azaz szimmetrikus típusú exponenciális. Továbbá a T obszervábilis által megadott mérés ekvivalens az M mérés t szerinti elmosásával.

[18] A finomított mérésből az eredeti visszanyerhető azáltal, hogy a kimenetel eloszlására alkalmazunk egy elmosást. Itt tehát azt használtuk ki, hogy a klasszikus Fisher-információ elmosással nem nőhet, lásd 5.3 tétel.

[19] [BNGJ03] javaslata az, hogy finomítsuk a mérést ilyenné. Valójában ha M eredetileg nem ilyen, akkor finomítható úgy is, hogy a finomított változat már nem legyen $S_{//\vartheta}$-vel felcserélhető, vagyis ne legyen optimális ϑ-ban – ez ellentmondás: M biztosan felveszi S_ϑ minden sajátaltér-projektorának valamely nemnulla konstansszorosát.

[20] Nem ezzel definiáltuk a kvantum score operátort, de hű állapotra ez az egyenlet ekvivalens az eredeti definícióval. Legfeljebb végtelen dimenziós esetben figyelni kell az értelmezési tartományokra.

Az $M' = M \circ t^{-1}$ elmosás továbbra is globálisan eléri az I_Q-határt is, így feltehetjük, hogy maga M a torzítatlan becslés. Az I_Q-határ erősebb lévén a Braunstein–Caves határnál, ez utóbbi is globálisan egyenlőségre teljesül, vagyis a család (4.21) alakú és az előző tétel bizonyításának megfelelően a torzítatlan becslés előáll az $X = \sum x E_{[x]}$ obszervábilis függvényeként. X kimenetelének sűrűségfüggvénye a spektrum számlálómértékére nézve $c(\vartheta) \exp\left\{F_\vartheta(x) \cdot \operatorname{Tr} S_0 E_{[x]}\right\}$. Ezen eloszláson a klasszikus Cramér–Rao egyenlőtlenség éles, vagyis – esetleges, csak x-től vagy csak ϑ-tól függő tagok kivételével – $F_\vartheta(x) = \vartheta \cdot x$. Ezt behelyettesítve a család ígért alakjához jutunk. □

4.17. Megjegyzés. Mivel többdimenziós paraméter esetén a Fisher-információs mátrix mint kvadratikus alak a paramétertér íveihez tartozó megszorításokból egyértelműen rekonstruálható, továbbá az önadjungált mátrixok rendezése épp az egydimenziós alterekre való megszorítások rendezésére épül, a Braunstein–Caves határ többdimenziós esetben is érvényes és az egyenlőség feltétele is lényegét tekintve azonos annyi módosítással, hogy minden egyes $S_{//\vartheta_i}$-nek felcserélhetőnek kell lennie $M(A)$-val. Ezért ha a Braunstein–Caves határ többdimenziós változata egyenlőségre teljesül, akkor a modell előáll (4.21) alakban.

Szintén az ívekről való felépítésből adódik, hogy a Braunstein–Caves határ több dimenzióban is éles abban az értelemben, hogy az összes mérésekhez tartozó $i(\vartheta; M)$ mátrixok legkisebb felső burkolója $I(\vartheta)$, hiszen egy dimenzió esetén lokálisan elérhető (4.20) segítségével.

Szintén lényeges új ötlet nélkül igazolható (lásd [BNGJ03]), hogy a többdimenziós Braunstein–Caves-határ a megfelelő regularitási feltételek mellett pontosan akkor érhető el globálisan, ha valamely X obszervábilisre és $F : \mathbb{R} \times \Theta \to \mathbb{R}$ függvényre $S_{//\vartheta i}(\vartheta) = F_{//\vartheta i}(X; \vartheta)$ és

$$S_\vartheta = e^{\beta(\vartheta)} \exp\left\{\tfrac{1}{2} F(X;\vartheta)\right\} S_0 \exp\left\{\tfrac{1}{2} F(X;\vartheta)\right\} \ .$$

Továbbá az I_Q-határ globális elérhetősége pontosan azon szimmetrikus típusú exponenciális családokra áll, ahol minden T_r felcserélhető és pontosan azon obszervábilisekre, melyeknek minden T_r függvénye. □

5. A kvantum Fisher-információs határ általánosításai

Ebben a szakaszban a Fisher-információ és vele együtt a variancia fogalmának általánosításait keressük. Ehhez először is tisztáznunk kell, milyen céllal tesszük ezt, így megfogalmazhatjuk, milyen elvárásaink lesznek az alternatívák iránt. Egyrészt az analógia miatt, másrészt az eredmények későbbi felhasználása okán a klasszikus esettel foglalkozunk majd először.

Kvantumrendszereken értelmezett mérések, műszerek esetében a célunk egy paraméterezett állapotcsaládban az állapot ismeretlen paraméterének, avagy a paraméter függvényének, esetleg az állapot funkcionáljának, funkcionáljainak, akár magának az állapotnak minél pontosabb becslése. Vizsgálódásainkkal most határozottan a véges dimenziós esetre és lokálisan torzítatlan mérésekre szorítkoznuk, az elsőrendű deriváltakra a folytonossági és bederiválhatósági feltételeket kikötve, magasabbrendű deriváltakkal pedig nem foglalkozunk. Ekkor a fenti esetek mindegyike visszavezethető a paraméter becslésére.

Az összes $\left(\mathcal{X} = \{1, \ldots, n\}, \mathcal{A} = 2^{\mathcal{X}}\right)$ feletti valószínűség-eloszlás szimplexét $\boldsymbol{\mathcal{P}}_n$, $\mathfrak{S}(\mathbb{C}^n)$-t röviden $\mathfrak{S}_n$ jelöli majd. Előbbi elemeire $Q = (q_1, \ldots, q_n)$, utóbbiéira $S = [\![s_{jk}]\!]$ típusú jelöléseket alkalmazunk.

5.1. Csencov unicitási tétele a kommutatív esetre

A kovariancia segítségével a mérés pontosságát, pontosabban pontatlanságát jellemezzük, a Fisher-információval pedig elméleti korlátot adunk az elérhető maximális pontosságra.

A ϑ paraméter mérésénél elérhető pontosságot úgy is tekinthetjük, hogy mennyire különböztethető meg $\mathbf{P}_\vartheta$ a közeli ϑ' elemekhez tartozó eloszlásoktól. Ebben a megközelítésben természetes ötletnek tűnik a Θ halmaz olyan Riemann-sokaság struktúráját keresni, melynél a geodetikus távolság a két végponthoz tartozó eloszlás statisztikai megkülönböztethetőségét méri, az érintővektor hossza pedig az iránymenti lokális megkülönböztethetőséget.[1]

Fisher példája remekül szemlélteti a két elv kapcsolatát. Az $z_i = 2\sqrt{q_i}$ szferikus reprezentációban $\Theta = \left\{z \in \mathbb{R}^n \,\middle|\, \|z\|_2 = 2\right\}$ halmaz természetes Riemann-struktúrájával a $z(\vartheta)$ egyparaméteres családban az érintő normanégyzete

$$\left\langle z_{/\vartheta} \middle| z_{/\vartheta} \right\rangle = \sum\nolimits_i \|z_i\|^2_{\mathbb{R}^n} = \sum\nolimits_i \left((z_i)_{/\vartheta} \partial_\vartheta \log z_i\right)^2 = \sum\nolimits_i q_i(\vartheta) \left(\partial_\vartheta \log p_i(\vartheta)\right)^2 = I(\vartheta) \ ,$$

épp a Fisher-információ; a $d(Q, R)$ geodetikus távolság:

$$d(Q, R) = 2 \arccos \sum\nolimits_i \sqrt{q_i r_i}$$

pedig monoton transzformáció erejéig a Hellinger távolsággal ekvivalens, mégpedig

$$d_H(Q, R) \triangleq \sqrt{\sum\nolimits_i \left(\sqrt{q_i} - \sqrt{r_i}\right)^2} = 2 \sin\left(\tfrac{1}{4} d(Q, R)\right) \ .$$

Megfordítva a gondolatmenetet, statisztikailag releváns $d(P, Q)$ Riemann-metrika definiálásával a Fisher-információval rokon mennyiséget kaphatunk az érintővektorok normanégyzete képében, az információs mátrixot pedig az érintőtér skalárszorzásának Gram-mátrixa helyettesítheti. Csencov ([Čen82]) nyomán megadjuk először a metrika elvárt tulajdonságait, majd a megfelelő metrikák karakterizációját.[2] A könyv a kategórielmélet fogalmaival ragadja meg a kérdéskört: valószínűségi

[1] Bármit takarjon is az (iránymenti) megkülönböztethetőség fogalma.

[2] A hivatkozott műben nem szerepel végességi megkötés, a tétel anélkül is igaz.

eloszláscsaládok mint objektumok között a Markov mag morfizusok által adott kategóriával dolgozik.

5.1. Definíció (Markov mag; elmosottabb, részletesebb, egyenértékű eloszlások). *Markov mag* egy $\Xi : \boldsymbol{\mathcal{P}}_m \to \boldsymbol{\mathcal{P}}_n$ affin leképezés[3] avagy *(oszlop-)sztochasztikus mátrix*.[4] Mivel egy ilyen leképezés „összemossa" az eloszlásban rejlő információkat, $R = \Xi Q$ „kevésbé informatív", mint Q. Ez alapján az $\mathcal{R} = \{R_\vartheta\} \subseteq \boldsymbol{\mathcal{P}}_n$ paraméterezett családot $\mathcal{Q} = \{Q_\vartheta\} \subseteq \boldsymbol{\mathcal{P}}_m$-nél *elmosódottabbnak* és $\mathcal{Q}$-t $\mathcal{R}$-nél *részletesebbnek*[5] tekintjük, ha – azonos a paraméterhalmaz és – teljesül a következő:

$$R_\vartheta = \Xi Q_\vartheta \qquad \big(\exists\, \Xi \in \mathrm{Aff}(\boldsymbol{\mathcal{P}}_m, \boldsymbol{\mathcal{P}}_n) : \ \forall \vartheta\big) \ .$$

Egyenértékűek, ha kölcsönösen részletesebbek egymásánál. Ez utóbbit jelöljük is:

$$\mathcal{R} \sim \mathcal{Q} \qquad \overset{\triangle}{\Longleftrightarrow} \qquad \begin{aligned} R_\vartheta &= \Xi Q_\vartheta \\ Q_\vartheta &= \Xi' R_\vartheta \end{aligned} \qquad \big(\exists\, \Xi \in \mathrm{Aff}(\boldsymbol{\mathcal{P}}_m, \boldsymbol{\mathcal{P}}_n), \Xi' \in \mathrm{Aff}(\boldsymbol{\mathcal{P}}_n, \boldsymbol{\mathcal{P}}_m) : \ \forall \vartheta\big) \ .$$

Egyszerű, de szemléletes példa Markov magra két elemi esemény összemosása (Ξ majdnem permutáció-mátrix, csak egy oszlopát megismételjük), valamint az információ teljes megsemmisítése (Ξ oszlopai azonosak).

A megkülönböztethetőségi metrikától joggal várjuk el, hogy elmosásra csökkenjen, azaz invariáns, sőt, monoton legyen a következő értelemben:

5.2. Definíció. Az azonos dimenziójú állapotok párjain – vagyis a kételemű állapotcsaládokon – értelmezett f függvény *invariáns*, ha $(Q_1, Q_2) \sim (R_1, R_2) \Longrightarrow f(Q_1, Q_2) = f(R_1, R_2)$. *Monoton*, ha még

$$f(\Xi Q_1, \Xi Q_2) \leq f(Q_1, Q_2) \qquad \big(P_i \in \boldsymbol{\mathcal{P}}_m,\ R_i \in \boldsymbol{\mathcal{P}}_n,\ \Xi \in \mathrm{Aff}(\boldsymbol{\mathcal{P}}_m, \boldsymbol{\mathcal{P}}_n)\big) \ . \tag{5.1}$$

Az információ-elméletben gyakran találkozhatunk monoton függvényekkel. Például a diszkrét esetben a

$$\mathrm{H}(P, Q) \triangleq \sum\nolimits_i p_i \left(\log p_i - \log q_i\right)$$

módon definiált relatív entrópia és a nemrég említett Hellinger-távolság is közéjük tartozik.

A $\boldsymbol{\mathcal{P}}_n$ valószínűségi szimplexek mindegyikén definiált Riemann-metrika akkor monoton, illetve invariáns, ha geodetikus távolságfüggvénye az.

5.3. Tétel (Csencov). *Konstans szorzótól eltekintve egyetlen monoton Riemann-metrika létezik a véges alaphalmazú (nem-elfajuló) valószínűségi eloszlásokon, mégpedig a szferikus reprezentációból adódó. Lényegében a Fisher-információ az egyetlen monoton metrika, amely előáll Riemann-struktúra geodetikus távolságfüggvényeként.* □

[3] A linearitási kikötést most is a keverésre való invarianca elvárása adja.
[4] Azaz: minden oszlopa valószínűségi vektor.
[5] nem feltétlenül ezek az elterjedt elnevezések…

5.2. Kvantumállapotok monoton Riemann-metrikái

Csencov és Morozova későbbi [MC89] cikke a kvantumállapotok esetével foglalkozik. Az objektumok értelemszerűen az állapotcsaládok. Morfizmusként ismét affin leképezéseket fogadunk el – amit persze lineárisan kiterjesztünk a nem 1 nyomú mátrixokra is –, az oszlop-sztochasztikus tulajdonság megfelelője egyrészről a nyomtartás, másrészről a pozitivitás. Az 1.2 szakaszban elmondottak alapján a teljes pozitivitást is elvárjuk. Így állapotcsaládok közti sztochasztikus leképezés alatt a megfelelő $\mathbb{SA}(\,\cdot\,)$ operátorterek közti nyomtartó, teljesen pozitív lineáris leképezést értünk.

$\mathfrak{S}_n \to \mathfrak{S}_n$ sztochasztikus leképezésre egy igen egyszerű példa a következő. Blokkosítsuk az S mátrixot és tegyük nullává a kapott blokkmátrix átlón kívüli blokkjait. Ez több lépésben megoldható úgy is, hogy mindig csak 2×2-es blokkmátrixok kilógó elemeit hagyjuk el, elég tehát a

$$\left[\begin{array}{c:c} A & B \\ \hdashline B^* & C \end{array}\right] \longmapsto \left[\begin{array}{c:c} A & 0 \\ \hdashline 0 & C \end{array}\right]$$

leképezés teljes pozitivitását igazolni, ami egyszerű az A.3 állítás ellenőrzésével.

A pusztán diagonális mátrixok közt ható $\tilde{\Xi} : \mathrm{Diag}(s) \mapsto \mathrm{Diag}(\Xi s)$ Markov-mag szintén teljesen pozitív. Kombinálva az előzővel: hagyjuk el az S minden átlón kívüli elemét, majd alkalmazzuk rá az átlóra megszorított $\tilde{\Xi}$ Markov-magot. Az így megadott $\mathbf{T}_\Xi$ leképezés kiterjesztése $\tilde{\Xi}$-nak, amit a diagonális állapotok klasszikus eloszlásoknak való megfeleltetésével úgy értelmezhetünk, hogy minden klasszikus Markov-mag kiterjeszthető kvantum-sztochasztikus leképezéssé.

Állapotcsaládok közt az előzővel szinte azonos módon definiálhatjuk a megfelelő relációkat, csupán a Markov mag helyére kell sztochasztikus leképezést írni. Erre építve értelmezzük állapotpárokon értelmezett valós függvények invarianciáját és monotonitását, valamint az invariáns Riemann-metrika fogalmát. Utóbbinak tehát a következőt kell minden $S \in \mathfrak{S}_n^\bullet$ hű állapotra és $\mathbf{T} : \mathfrak{B}(\mathbb{C}^n) \to \mathfrak{B}(\mathbb{C}^n)[\cdots]$ sztochasztikus leképezésre teljesítenie:

$$\big\langle \mathbf{T}(A) \big| \mathbf{T}(A) \big\rangle_{T_{\mathbf{T}(S)}g} \leq \langle A|A\rangle_{T_S g} \qquad \big(S \in \mathfrak{S}_n^\bullet,\ A \in \mathbb{SA}(\mathbb{C}^n),\ \mathrm{Tr}\, A = 0\big)\ , \tag{5.2}$$

rövidebb alakban

$$\mathbf{T}^* \mathbf{J}_{\mathbf{T}(S)}^{-1} \mathbf{T} \leq \mathbf{J}_S^{-1}\ , \tag{5.3}$$

ahol a $\mathbf{J}_S : \mathfrak{B}(\mathbb{C}^n) \to \mathfrak{B}(\mathbb{C}^n)$ szuperoperátort úgy definiáljuk, hogy a $\mathfrak{B}(\mathbb{C}^n)$ Hilbert–Schmidt skalárszorzatát kösse össze az érintőtérként örökölttel, mégpedig a $\langle A|B\rangle_2 = \mathrm{Tr}\, AB = \big\langle A \big| \mathbf{J}_S B \big\rangle_{T_S g}$ képlet szerint.[6]

Információs metrika alatt mindig a hű állapotcsaládok (5.2) – avagy (5.3) – értelemben monoton Riemann-metrikáját fogjuk érteni.

Az idézett cikk részlegesen karakterizálta az invariáns metrikákat, a következő módon:

5.4. Tétel (Csencov, Morozova). *Tekintsünk egy, a hű kvantumállapotok családjain definiált g invariáns Riemann-metrikát. Legyen $S = \mathrm{Diag}(s_1, \ldots, s_n)$ diagonalizált kvantum-állapot*[7] *és $A = [\![a_{ij}]\!] \in T_S\mathfrak{S}_n \equiv \mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)|_{\mathrm{Tr}=0}$ tetszőleges. Ekkor*

$$\langle A|A\rangle_{T_S g} = C_g \sum_i s_i^{-1} A_{ii}^2 + 2 \sum_{i<j} c_g(s_i, s_j)\, \|A_{ij}\|^2\ , \tag{5.4}$$

ahol C_g pozitív konstans, a $c_g(x, y)$ függvény pedig szimmtrikus és reciprok homogén: $c(\lambda x, \lambda y) = \lambda^{-1} c(x, y)$.

[6] Ez utóbbi összefüggést $\big\langle \mathbf{J}_S B \big|_{T_S g} = \big\langle B \big|_2$ alakra írva lényegében egy szuperoperátor definíciójához jutunk. $\mathbf{J}_S$ még elő fog kerülni részletesebben, most főleg azért írtuk fel a monotonitás ezen jellemzését is, hogy minden egy helyütt legyen.

[7] azaz S (valamelyik, és persze ortogonormált) sajátbázisában reprezentálunk

Nem bizonyítottak azonban elégséges feltételt a Riemann-metrika monotonitására. Mielőtt továbblépnénk, vizsgáljuk meg közelebbről az (5.4) előállítást. Szorítkozzunk pusztán egyidejűleg diagonalizálható állapotcsaládokra, így részkategóriaként éppen a klasszikus valószínűségi eloszlások kategóriáját kapjuk, ha a mátrixokat azonosítjuk az átlójukkal a család közös diagonalizációjánál.[8] Ezért a Riemann-struktúra megszorítása a klasszikus unicitási tétel miatt egyértelmű.

5.5. Következmény. Ha $S \in \mathfrak{S}_n^\bullet$, $A \in T_S\mathfrak{S}_n^\bullet \subset \mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)$, $\operatorname{Tr} A = 0$ és $[S, A] = 0$ – ez utóbbi ekvivalens azzal, hogy együtt diagonalizálhatóak –, akkor

$$\langle A|A\rangle_{T_Sg} = C_g \cdot \operatorname{Tr} S^{-1}A^2 \,.$$

Ez alapján az érintőteret felbonthatjuk

$$T_S\mathfrak{S}_n = T_S\mathfrak{S}_n^{\mathsf{c}} \oplus T_S\mathfrak{S}_n^{\mathsf{q}}$$

alakban, ahol $T_S\mathfrak{S}_n^{\mathsf{c}} \triangleq \{A|[A,S]=0\}$ és $T_S\mathfrak{S}_n^{\mathsf{q}} \triangleq (T_S\mathfrak{S}_n^{\mathsf{c}})^\perp$ ennek ortogonális kiegészítő altere a Hilbert–Schmidt belső szorzatra nézve. A polarizációs azonosság $T_S\mathfrak{S}_n^{\mathsf{c}}$ elemein egyértelműen meghatározza a $\langle\cdot|\cdot\rangle_g$ skalárszorzást – mely tehát csak C_g-tól függ – és a $c_g(x,y)$ függvény csupán a nem-felcserélhető komponensnél számít, amint azt a képlet is mutatja.

A karakterizációs tételhez még szükségünk van egy további fogalomra.

5.6. Definíció. Az $f : \mathbb{R}_\oplus \to \mathbb{R}_\oplus$ függvény *operátor-monoton*, ha tetszőleges $0 \le X \le Y$ önadjungált operátorokra $0 \le f(X) \le f(Y)$ is teljesül. Ismert, hogy minden ilyen függvény analitikus, valamint az operátor-monotonitás ekvivalens az operátor-konkávitással.[9]

Legyenek $\mathbf{L}_S$ és $\mathbf{R}_S$ az S-sel balról illetve jobbról való szorzás operátorai: $\mathbf{L}_S(A) = SA$, $\mathbf{R}_S(A) = AS$.

5.7. Tétel. *Legyen f olyan operátor-monoton függvény, amelyre még $f(t) = tf\big(t^{-1}\big)$ teljesül minden $t > 0$ számra. Ekkor a*

$$\mathbf{J}_S \triangleq f\big(\mathbf{L}_S\mathbf{R}_S^{-1}\big)\mathbf{R}_S \tag{5.5}$$

szuperoperátor segítségével a hű állapotokban definiált

$$(A|B)_{T_Sg} \triangleq \operatorname{Tr}\big(A\mathbf{J}_S^{-1}(B)\big) \tag{5.6}$$

Riemann-metrika monoton.

Operátor-monoton függvény analitikus, így az érintőtér megadott skaláris szorzása S sima függvénye. Az $f(t) = tf\big(t^{-1}\big)$ feltétel biztosítja, hogy önadjungált B-re $\mathbf{J}_S^{-1}(B)$ is önadjungált, így a skalárszorzat valós. Hű, azaz invertálható[10] S esetén $\mathbf{J}_S$ is invertálható és pozitív definit, a metrika tehát nem-elfajuló. Már csak a monotonitást kell belátnunk.

[Pet86] állítása alapján tetszőleges f operátor-monoton függvényre, E és F pozitív definit mátrixokra, $\mathbf{T}$ sztochasztikus leképezésre és annak a Hilbert–Schmidt szorzat szerinti $\mathbf{T}^*$ adjungáltjára teljesül

$$\mathbf{T}\mathbf{R}_F^{1/2} f\big(\mathbf{L}_E\mathbf{R}_F^{-1}\big)\mathbf{R}_F^{1/2}\mathbf{T}^* \le \mathbf{R}_{\mathbf{T}(F)}^{1/2} f\big(\mathbf{L}_{\mathbf{T}(E)}\mathbf{R}_{\mathbf{T}(F)}^{-1}\big)\mathbf{R}_{\mathbf{T}(F)}^{1/2} \,, \tag{5.7}$$

amibe $E = F = S$-et helyettesítve $\mathbf{T}\mathbf{J}_S\mathbf{T}^* \le \mathbf{J}_{\mathbf{T}(S)}$, amivel ekvivalens a monotonitás:

$$\mathbf{T}^*\mathbf{J}_{\mathbf{T}(S)}^{-1}\mathbf{T} \le \mathbf{J}_S^{-1} \,. \quad \square \tag{5.8}$$

[8] A $\Xi \mapsto \mathbf{T}_\Xi$ megfeleltetés mutatja, hogy minden klasszikus morfizmust megkapunk megszorításként, mást pedig nyilván nem kaphatunk.

[9] Operátor-monoton függvényekről részletesebben [HP82] ír.

[10] Ne feledjük, hogy véges dimenzióban vagyunk – végtelen dimenzióban egy sűrűségi operátor szükségképpen nem invertálható, pontosabban inverze nem korlátos.

Érdemes a $\mathbf{J}_S$ operátor hatását megadni. Jelölje $\star$ a mátrixok elemenkénti szorzás műveletét.[11] Az operátorok mátrixait S sajátbázisa szerint fejtsük ki – azaz $S = \mathrm{Diag}(s_1, \dots, s_n) = \mathrm{Diag}\, s$ – és legyen $e \in \mathbb{R}^n$ a csupa 1 vektor. Ekkor $\mathbf{R}_S(B) = B \star (se^\top)$, $\mathbf{L}_S(B) = B \star (es^\top)$ és $f\big(\mathbf{L}_S\mathbf{R}_S\big)(B) = B \star \left[\!\left[f\big(\frac{s_j}{s_i}\big)_{i,j} \right]\!\right]$. A $\mathbf{J}_S$ operátor tehát argumentumának (i,j) indexű elemét $s_i \cdot f\big(\frac{s_j}{s_i}\big)$-vel szorozza meg. Az $E_{ij} \triangleq |\psi_i\rangle\langle\psi j|$ mátrix-bázisban:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_S(B) &= \sum_{i,j} s_i \cdot f\Big(\frac{s_j}{s_i}\Big) \cdot b_{ij} E_{ij}\,, \\ \mathrm{Tr}\big(A\mathbf{J}_S(B)\big) &= \sum_{i,j} s_j \cdot f\Big(\frac{s_i}{s_j}\Big) \cdot a_{ij} b_{ji} \qquad \text{és} \\ \mathrm{Tr}\big(A\mathbf{J}_S^{-1}(B)\big) &= \sum_{i,j} \frac{1}{s_j \cdot f(s_i/s_j)} \cdot a_{ij} b_{ji}\,. \end{aligned} \qquad \left| \begin{aligned} S &= \textstyle\sum_i s_i E_{ii} = \mathrm{Diag}\, s \\ A &= \textstyle\sum_{i,j} a_{ij} E_{ij} = [\![a_{ij}]\!] \\ B &= \textstyle\sum_{i,j} b_{ij} E_{ij} = [\![b_{ij}]\!] \end{aligned} \right. \tag{5.9}$$

Az előző két tétel után természetes kérdés, hogy mi az (5.4), (5.5) és (5.6) képletek kapcsolata. (5.9) alapján ez:

$$c(x,y) = \frac{1}{y\, f(x/y)}\,; \qquad f(t) = \frac{1}{c(t,1)}\,; \qquad C = f(1) = c(1,1) \qquad \big(t, x, y \in \mathbb{R}_+\big)\,. \tag{5.10}$$

Néhány példa az $f(t) = tf\big(t^{-1}\big)$ feltételnek megfelelő operátor-monoton függvényekre:

$$\frac{1+x}{\log x}, \quad \frac{x-1}{\log x}\frac{2\sqrt{x}}{1+x}, \quad \left(\frac{x-1}{\log x}\right)^2 \frac{2}{1+x}, \quad \frac{1+x}{2}, \quad \frac{2x^{\alpha+1/2}}{1+x^{2\alpha}} \quad \big(0 \le \alpha \le \tfrac{1}{2}\big)\,.$$

5.8. Tétel. *A hű állapotok családjainak minden monoton Riemann-metrikája előáll az 5.7 tétel által adott alakban.*

A Csencov–Morozova-tétel szerinti előállításból fejezzük ki $f(t)$-t az (5.10) képlettel, így $f(t) = tf\big(t^{-1}\big)$. A [Pet96] által közölt[12] módszert követve igazoljuk, hogy f operátor-monoton.

Kiválasztunk egy konkrét $\mathbf{T} : \mathfrak{S}_{k+m} \to \mathfrak{S}_{k+m}$ sztochasztikus leképezést:[13]

$$\mathbf{T} : \begin{bmatrix} X_1 & A \\ A^* & X_2 \end{bmatrix} \longmapsto \frac{1}{2}\begin{bmatrix} X_1 + X_2 & A + A^* \\ A + A^* & X_1 + X_2 \end{bmatrix}\,.$$

A $\mathbf{T}$-monotonitás feltétele az $S = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} S_1 & \\ & S_2 \end{bmatrix}$ sűrűségmátrixra $\mathbf{T}\mathbf{J}_{\mathbf{T}(S)}\mathbf{T}^* \le \mathbf{J}_S$ adódik, a Hilbert–Schmidt szorzatra nézve önadjungált szuperoperátorok rendezésével értve. Az $\hat{X} = \begin{bmatrix} X & \\ & X \end{bmatrix}$ operátorral $\left\langle \hat{X} \middle| \mathbf{J}_* \middle| \hat{X} \right\rangle_{\mathsf{H--S}}$ szendvicset készítve az előírt relációból

$$\mathrm{Tr}\left(\begin{bmatrix} X & \\ & X \end{bmatrix} \cdot \mathbf{J}_{\mathbf{T}(S)} \begin{bmatrix} X & \\ & X \end{bmatrix} \right) \ge \mathrm{Tr}\left(\begin{bmatrix} X & \\ & X \end{bmatrix} \cdot \mathbf{J}_S \begin{bmatrix} X & \\ & X \end{bmatrix} \right)\,.$$

Mivel $\mathbf{J}_S$ szorzásoperátor, diagonális blokkmátrixokon a hatása szétesik és a fenti relációnak blokkonként teljesülnie kell. Az $\bar{S} = \frac{1}{2}(S_1 + S_2)$ jelöléssel $\mathbf{T}(S) = \begin{bmatrix} \bar{S} & \\ & \bar{S} \end{bmatrix}$ és

$$\mathrm{Tr}\big(X \cdot \mathbf{J}_{\bar{S}}(X)\big) \ge \tfrac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\big(X \cdot \mathbf{J}_{S_1}(X)\big) + \tfrac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\big(X \cdot \mathbf{J}_{S_2}(X)\big) \qquad (\forall X)\,,$$

vagyis $S \mapsto \mathbf{J}_S$ konkáv leképezés a sűrűségmátrixokon. Ez a linearitás miatt nyilván kiterjed minden pozitív önadjungált mátrixra is. Amennyiben Y pozitív definit, a $\tilde{Y} = \begin{bmatrix} Y & \\ & I \end{bmatrix}$ mátrixhoz tartozó $\mathbf{J}_{\tilde{Y}}$ leképezés hatását szét tudjuk bontani az egyes blokkokra, hiszen az $\tilde{Y}$-nal való jobbról

[11] Persze operátorokra ez csak akkor értelmes, ha előre rögzítünk egy bázist, amelyben a mátrixokat reprezentáljuk.
[12] ld. még [Pet98]
[13] Ez a kimeneteli halmaz egy permutációjának megfelelő sztochasztikus leképezés és az identitás átlaga, így nyilván teljesen pozitív.

szorzás csak a felső két blokkon nem lesz identikus – hanem $\mathbf{R}_Y$ –, míg $\mathbf{L}_{\tilde{Y}}$ a felső sorra $\mathbf{L}_Y$ módon hat és az alsón identikus. Ezek szerint

$$\mathbf{J}_{\tilde{Y}} : \left[\begin{array}{c:c} A & B \\ \hdashline C & D \end{array}\right] \longmapsto \left[\begin{array}{c:c} \mathbf{J}_Y A & \mathbf{R}_{f(Y^{-1})Y} B \\ \hdashline \mathbf{L}_{f(Y)} C & D \end{array}\right] \underset{tf(t^{-1})=f(t)}{\equiv} \left[\begin{array}{c:c} \mathbf{J}_Y A & \mathbf{R}_{f(Y)} B \\ \hdashline \mathbf{L}_{f(Y)} C & D \end{array}\right] ,$$

és persze $Y \mapsto \mathbf{J}_{\tilde{Y}}$ konkáv. Ezért Y függvényében minden rögzített X-re konkáv a következő

$$\operatorname{Tr}\left(\left[\begin{array}{c:c} & X^* \\ \hdashline X & \end{array}\right] \cdot \mathbf{J}_{\tilde{Y}} \left[\begin{array}{c:c} & X^* \\ \hdashline X & \end{array}\right]\right) = \operatorname{Tr}\big(X \cdot (X^* f(Y))\big) + \operatorname{Tr} X^* \cdot (f(Y) \cdot X) = 2 \operatorname{Tr}\big(X^* f(Y) X\big) .$$

Ha X egyszerűen az x vektor által kifeszített altér projektora, akkor eszerint minden rögzített x-re

$$Y \longmapsto \operatorname{Tr} X^* f(Y) X = x^* f(Y) x$$

is konkáv, vagyis f operátor-konkáv, így operátor-monoton is egyben. □

5.9. Következmény (Monoton metrikák karakterizációja). *Az* (5.4) *képlet akkor és csakis akkor határoz meg monoton Riemann-metrikát, ha az* (5.10) *alapján megadott f függvény operátor-monoton és $f(t) = tf\big(t^{-1}\big)$. Emellett minden monoton Riemann-metrika származtatható ily módon.*

5.10. Definíció (Fisher-illesztett metrika). A $\mathbf{J}_S$ operátor f függvényében monoton növekvő, így $f \mapsto \mathbf{J}_S^{-1}$ és $f \mapsto \langle \cdot | \cdot \rangle_{T_S g}$ monoton csökkenő, a kapott metrikák összehasonlítása pedig a megfelelő operátor-monoton függvények fordított összehasonlításával egyenértékű. Persze egy Riemann-metrika konstansszorosa „lényegében" ugyanazt a geometriát jelenti a sokaságon, az összehasonlítást valamilyen normalizálás mellett értelmes végezni. A metrika lineárisan homogén függvénye f-nek, így ezzel egyben f-et is normáljuk. A legtermészetesebbnek tűnő megoldás a $T_S\mathfrak{S}_n^{\mathsf{c}}$ altéren megszabni a feltételt, például $C_g = 1$ előírásával, melynek $f(1) = 1$ avagy

$$\langle A|A\rangle_{T_S g} = \operatorname{Tr} S^{-1} A^2 \qquad \big([A, S] = 0\big) \tag{5.11}$$

felel meg. Az ilyen tulajdonságú metrikákat *Fisher-illesztettnek* nevezzük, a továbbiakban ezekkel foglalkozunk.

5.11. Megjegyzés. Mint azt [KA80] igazolja, az $f(1) = 1$, $f(t) = tf\big(t^{-1}\big)$ feltételeknek eleget tevő operátor-monoton függvények közt van minimális és maximális, mégpedig

$$f_{\mathsf{min}}(t) = \frac{2t}{1+t} , \qquad f_{\mathsf{max}}(t) = \frac{1+t}{2} .$$

5.12. Példa. Legyen most $f(t) = f_{\mathsf{max}}(t) = \frac{1+t}{2}$. Ebben az esetben $c(x, y) = \frac{2}{x+y}$,

$$\mathbf{J}_S B = \sum_{i,j} \frac{s_i + s_j}{2} \cdot b_{ij} E_{ij} = B \circ S , \qquad \text{azaz}$$

$$\operatorname{Tr} A \mathbf{J}_S B = (A|B)_S \qquad \text{és}$$

$$\big(A\big|\mathbf{J}_S^{-1}(B)\big)_S = \operatorname{Tr} A\big(\mathbf{J}_S^{-1}(B) \circ S\big) = \operatorname{Tr} AB . \tag{5.12}$$

Így tehát visszakapjuk a kovariancia és a Fisher-információ szokásos alakját. Ez alapján

(i) A kvantum Fisher-információ monoton információs metrikát ad.

(ii) Az összes klasszikusan Fisher-illesztett információs metrikák közül a legkisebb tartozik hozzá.

Ennek értelmezését a következő szakaszban adjuk majd meg.

5.3. Dualitás kovariancia és Fisher-információ között

Az előző fejezetben az $\mathfrak{S}_n^\bullet$ sokaság érintőterén, azaz $\mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)\big|_{\mathrm{Tr}=0}$-n definiáltunk információs metrikát. Az (5.6) képlet persze nemnulla nyomú mátrixra is értelmes és az $\langle S|S\rangle_{T_S} = \mathrm{Tr}\, S^{-1}$ képletnek megfelelően terjeszti ki a metrikát az egész $\mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)$-re. A $\mathbf{J}_S$ által $\mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)$-en megadott információs metrika ezen kiterjesztését $\langle\,\cdot\,|\,\cdot\,\rangle_{I(\mathbf{J},S)}$ jelöli majd.

Ezen a téren korábban már megadtunk egy másik skalárszorzást, mégpedig az obszervábilisek kovarianciájához kapcsolódóan $(X|Y)_S = \mathrm{Tr}\, S(X\circ Y)$ alakban – nevezzük ezt ezt kovarianciametrikának. A Cramér–Rao egyenlőtlenség és bizonyítása ezekkel a fogalmakkal különösen áttekinthető alakot ölt, ha $\mathbf{J}_S$-t a Fisher-információhoz választjuk. Tekintsünk egy, az $S_0 = S$ hű állapoton $S_{/\vartheta}$ irányban áthaladó S_ϑ egyparaméteres állapotcsaládot. A ϑ ismeretlen paraméter 0-ban lokálisan torzítatlan becsléseit vizsgáljuk, X a méréshez tartozó obszervábilis. Így

$$\mathrm{Tr}\, X S_{/\vartheta} = 1\,,$$

mert a $\mathrm{Tr}\, X S_\vartheta = \vartheta + o(\vartheta)$ képletbe be lehet deriválni. Másrészt (5.12) alapján

$$\mathrm{Tr}\, X S_{/\vartheta} = \big(X\big|\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})\big)_S\,.$$

A Cauchy-egyenlőtlenség szerint

$$(X|X)_S\,\big(\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})\big|\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})\big) \geq \big(X\big|\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})\big)_S^2\,,$$

mindezt összeolvasva

$$(X|X)_S \geq \frac{1}{\big(\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})\big|\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})\big)_S}\,.$$

Az egyenlőség feltétele a Cauchy-egyenlőtlenségben $X = \lambda\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})\quad\big(\lambda\in\mathbb{R}\setminus\{0\}\big)$, vagyis lényegében csak a kvantum score-operátor mérése hatásos.

Az egész levezetés kulcsa az, ahogy a lokális torzítatlansághoz kapcsolódó $\mathrm{Tr}(\,\cdot\,)(\,\cdot\,) \equiv \langle\,\cdot\,|\,\cdot\,\rangle_2$ skalárszorzást a $\mathbf{J}_S^{-1}$ szuperoperátor segítségével $(\,\cdot\,|\,\cdot\,)_S$ skalárszorzattá alakítottuk, mely – a mérés várható értéke 0 lévén – a varianciát fejezi ki az S állapotban. Amennyiben más információs tenzort használunk, a Cauchy-egyenlőtlenséget is más skaláris szorzattal tudjuk felírni. Ez alapozza meg a következő definíciót:

5.13. Definíció. *Általánosított kovariancia-tenzornak* nevezünk egy $\mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)\times\mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)\to\mathbb{R}$ skalárszorzást, ha valamely, az 5.7 tétel által adott $\mathbf{J}_S$ szuperoperátorral

$$(X|Y)_{V(\mathbf{J},S)} = \mathrm{Tr}\, X\mathbf{J}_S(Y) \tag{5.13}$$

alakú. Az $\mathcal{S}\subseteq\mathfrak{S}_n^\bullet$ paraméterezett – a paraméter nyugodtan lehet többdimenziós – állapotcsalád S_ϑ pontbeli $I_{\mathbf{J}}(\vartheta)$ *általánosított Fisher-információs mátrixa* pedig a megfelelő $\langle\,\cdot\,|\,\cdot\,\rangle_{I(\mathbf{J},\vartheta)}$ információs tenzor $T_S\mathcal{S}\leq T_S\mathfrak{S}_n^\bullet$ altérre vett megszorításának visszahúzása a paraméterezés lineáris érintőleképezése mentén az $\mathbb{R}^p = T_\vartheta\Theta$ térre. Konkrétan

$$\big(I_{\mathbf{J}}(\vartheta)\big)_{ij} = \Big\langle\tfrac{\partial}{\partial\vartheta_i}S_\vartheta\Big|\tfrac{\partial}{\partial\vartheta_j}S_\vartheta\Big\rangle_{I(\mathbf{J},\vartheta)} = \mathrm{Tr}\Big[\big(\tfrac{\partial}{\partial\vartheta_i}S_\vartheta\big)\cdot\mathbf{J}_S^{-1}\big(\tfrac{\partial}{\partial\vartheta_j}S_\vartheta\big)\Big]\;; \tag{5.14}$$

$$\begin{aligned}\tau^\top I_{\mathbf{J}}(\vartheta)\tau &= \big\langle\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}S_{\vartheta+x\tau}\big|\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}S_{\vartheta+x\tau}\big\rangle_{I(\mathbf{J},\vartheta)}\\ &= \mathrm{Tr}\Big[\big(\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}S_{\vartheta+x\tau}\big)\cdot\mathbf{J}_S^{-1}\big(\tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}S_{\vartheta+x\tau}\big)\Big]\qquad\big(\tau\in\mathbb{R}^p,\,x\in\mathbb{R}\big)\,.\end{aligned} \tag{5.15}$$

Egydimenziós paraméterre a kvantum-score általános megfelelője $\mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})$.[14]

[14] A többdimenziós paraméter esetére szóló kvantum-score definícióját és a használt jelöléseket lásd a Bhattacharyya-határnál. Előlegezzünk meg annyit, hogy az egyes parciális deriváltakhoz tartozó parciális score-operátorok együttese.

Az információs tenzor $\mathbf{T}^*\mathbf{J}^{-1}_{\mathbf{T}(S)}\mathbf{T} \leq \mathbf{J}_S^{-1}$ monotonitását ekvivalens módon átírhatjuk a kovariancia-tenzor monotonitási tulajdonságává ($\mathbf{T} : \mathfrak{B}(\mathbb{C}^n) \to \mathfrak{B}(\mathbb{C}^n)$ sztochasztikus leképezés):

$$\mathbf{T}\mathbf{J}_S\mathbf{T}^* \leq \mathbf{J}_{\mathbf{T}(S)} \ ,$$

azaz

$$\big(\mathbf{T}^*(X)\big|\mathbf{T}^*(X)\big)_{V(\mathbf{J},S)} \leq (X|X)_{V(\mathbf{J},\mathbf{T}(S))} \qquad \big(S \in \mathfrak{S}_n^\bullet,\ X \in \mathbb{SA}(\mathbb{C}^n)\big) \ .$$

Ennek tartalma, hogy kvantum-sztochasztikus leképezés során a transzformált állapotban a transzformált obszervábilis kovariancia-mátrixa legalább annyi, mintha csak a mérési eredményt transzformálnánk és annak számítanánk ki a kovariancia-mátrixát. Vagyis „az állapot sztochasztikus képe nem lehet informatívabb, mint az eredeti állapot”. Megtehettük volna, hogy ebből a monotonitási fogalomból indulva építjük fel a kovariancia- és információs tenzorok karakterizációját.

Természetesen a kovariancia-metrika együtt nő az 5.7 tételben szereplő f operátor-monoton függvénnyel, azaz f_{min} adja a legkisebb és f_{max} a legnagyobb kovariancia-változatot.

Értelmezhetnénk ezt úgy is, hogy a Fisher-információ eredeti változata adja a legélesebb határt – de ekkor figyelmen kívül hagynánk, hogy az információs határok rendre különböző varianciafogalmakhoz adnak becslést. Pontosabbnak látszik az a megfogalmazás, hogy minden információs metrika közül a kvantum Fisher-információ értékeli legkevesebbre a minta nem-klasszikus információ-tartalmát: amennyiben egy állapotcsaláddal egyenlő információ-tartalmú klasszikus családot keresünk, a Fisher-információ szinten tartása mellett kapjuk a legkevesebb klasszikus Fisher-információjú családot mint a metrika által egyenlően informatívnak minősítettet.

Ezzel összefüggésben: a variancia szokásos értelmezése ad minden monoton szóródási metrika közül legnagyobb súlyt a nem-klasszikus sztochasztikus elemeknek.

A Fisher-információ $\mathbf{J}_S$ formalizmussal történő megadása egyben azt az egyébként sem megoldhatatlan feladatot is megkönnyíti, hogy felírjuk egy paraméterezett család $S_{//\vartheta}$ kvantum score-operátorát, illetve a Fisher-információs mátrixot. Ha $S_\vartheta = \sum_i s_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, akkor az $S_{//\vartheta} = \mathbf{J}_S^{-1}(S_{/\vartheta})$ mátrix elemei a $\{|\psi_i\rangle\}$ bázisban kifejtve $S_{/\vartheta} = \sum_{ij} s_{/\vartheta(i,j)}E_{ij}$ jelöléssel a következők:

$$s_{//\vartheta(i,j)} = 2\frac{s_{/\vartheta(i,j)}}{s_i + s_j} \ ,$$

$$I_Q(\vartheta) = \sum_i s_i^{-1}\big(s^2_{/\vartheta(i,i)}\big) + 2\sum_{i<j}\frac{s_i}{(s_i+s_j)^2}\cdot s^2_{/\vartheta(i,j)} \ .$$

5.14. Példa. Érdekes az minimális f-hez tartozó metrika és információ megadása is: ez az, amelyik a legtöbbre értékeli a minta kvantumos információtartalmát a klasszikus információtartalomhoz képest.[15] Legyen hát $f(t) = \frac{2t}{1+t}$, $c(x,y) = \frac{x+y}{2xy}$. Ekkor S sajátbázisában kifejtve

$$\big[\mathbf{J}_S(B)\big]_{ij} = 2\frac{s_is_j}{s_i+s_j}\cdot b_{ij} \ ,$$

$$(A|B)_{V(\mathbf{J},S)} = \operatorname{Tr} A\mathbf{J}_S(B) = \sum_{i,j} 2\frac{s_is_j}{s_i+s_j}a_{ij}b_{ij} \ ;$$

$$\big[\mathbf{J}_S^{-1}(B)\big]_{ij} = \frac{s_i+s_j}{2s_is_j}\cdot b_{ij} \ ,$$

$$\langle A|B\rangle_{I(\mathbf{J},S)} = \operatorname{Tr} A\mathbf{J}_S^{-1}(B) = \sum_{i,j}\tfrac{1}{2}\big(s_j^{-1}+s_i^{-1}\big)\cdot a_{ij}b_{ji} = \operatorname{Tr} S^{-1}(A\circ B) \ .$$

[15] És a megfelelő szóródási metrika bünteti legkevésbé a nem-klasszikus véletlen elemeket…

5.4. A Bhattacharyya-határ

A klasszikus statisztikában magasabbrendű bederiválhatósági feltételek és a lokális torzítatlanság magasabbrendű deriváltakra való érvényessége esetén a Bhattacharyya-fele becsléssel általában a Fisher-információs határnál pontosabb becslés adható a statisztika varianciájára.[16]

Először a kommutatív esetre vonatkozó eredményt ismertetjük, majd a szükséges jelöléseket vezetjük be, végül ezek segítségével megfogalmazzuk a kvantumos változatot.

5.4.1. Bhattacharyya-határ klasszikus eloszláscsaládokra.

Tekintsünk egy λ-ra abszolút folytonos $\mathcal{P} = \{P_\vartheta | \vartheta \in \Theta\}$ $\big(\Theta \subseteq \mathbb{R}^p\big)$ eloszláscsaládot, melyben a sűrűségfüggvény $\mathcal{P}$-mm. x-re sokszor folytonosan differeciálható.

Legyen $\partial_i = \frac{\partial}{\partial \vartheta_i}$, a $b = (b^1, \dots, b^p)^\top \in \mathbb{N}^p$ vektorhoz pedig $\partial^b = \partial_1^{b^1} \partial_2^{b^2} \cdots \partial_p^{b^p}$. Végül az $a_1, \dots, a_l$ oszlopok alkotta $A \in \mathbb{N}^{p \times l}$ mátrixhoz a ∂^A sorvektor álljon a következő formális deriválás-operátorokból: $\partial^A = [\partial^{a_1}, \dots, \partial^{a_l}]$. Például $\partial^{\mathbf{1}_p} = \mathrm{grad}_p$, hiszen ekkor a sorvektor i-edik eleme egyszerűen ∂_i. A ∂^A rendű (parciális) deriválásra vezessük be a $(\,\cdot\,)_{/\!/_A \vartheta}$ jelölést.

A Bhattacharyya-féle score-függvény (legyen a neve A-score) képlete ekkor a következő:

$$w_A(x, \vartheta) \triangleq f_{/\!/_A \vartheta}^\top(x) \triangleq \left[\frac{\partial^A f_\vartheta(x)}{f_\vartheta(x)}\right]^\top = \frac{1}{f_\vartheta(x)} \left[\partial^{a_1} f_\vartheta(x), \dots, \partial^{a_l} f_\vartheta(x)\right]^\top \in \mathbb{R}^l \,. \tag{5.16}$$

Tegyük fel, hogy

(i) Az A-score λ-mm. x-re létezik és folytonos ϑ-ban.

(ii) Az $\mathbf{E}_\vartheta(1)\,\lambda(\mathrm{d}x) = 1$ várható érték képletébe A-szor be lehet deriválni, vagyis

$$\int_{\mathcal{X}} f_{/_A \vartheta}(x) \lambda(\mathrm{d}x) \triangleq \int_{\mathcal{X}} \partial^A f_\vartheta(x) \lambda(\mathrm{d}x) \underset{\triangle}{=} \partial^A \int_{\mathcal{X}} f_\vartheta \lambda(\mathrm{d}x) = 0 \,. \tag{5.17}$$

(iii) Az alábbi mátrix véges és nem-elfajuló:

$$B_A(\vartheta) \triangleq \mathbf{\Sigma}_\vartheta\big(w_A(x, \vartheta)\big) = \mathbf{E}_\vartheta\big(f_{/\!/_A \vartheta}^\top f_{/\!/_A \vartheta}\big) \,, \tag{5.18}$$

ami persze maga után vonja, hogy A oszlopai különbözőek.

(iv) A $T : \mathcal{X} \to \mathbb{R}^k$ statisztika minden ϑ-ra véges szórású, a $g(\vartheta) \triangleq \mathbf{E}_\vartheta(T)$ függvény A-differenciálható és definiáló egyenletébe A-szor be lehet deriválni:

$$\begin{aligned} g_{/_A \vartheta} &\triangleq \partial^A \int_{\mathcal{X}} T(x) f_\vartheta(x) \lambda(\mathrm{d}x) \underset{\triangle}{=} \int_{\mathcal{X}} T(x) f_{/_A \vartheta}(x) \lambda(\mathrm{d}x) = \mathbf{E}_\vartheta\big(T(x) \cdot f_{/\!/_A \vartheta}(x)\big) \\ &= \mathrm{cov}_\vartheta\big(T, w_A(\vartheta)\big) \,. \end{aligned}$$

Itt persze $g_{/_A \vartheta} : \Theta \to \mathbb{R}^{k \times l}$.

5.15. Tétel (A rendű Bhattacharyya-határ). *Az iménti feltételek mellett a T statisztika szórása alulról becsülhető az A-(Bhattacharyya-)határral:*

$$\mathbf{\Sigma}_\vartheta(T) \geq g_{/_A \vartheta} B(\vartheta)^{-1} g_{/_A \vartheta}^\top \,. \tag{5.19}$$

[16] Bár a többrendbeli lokális torzítatlanság a kvantum-statisztikában igen erős – a mérési eloszlás állapotfüggésének linearitása folytán akár teljesíthetetlen – feltétel, remélhetőleg nem csak teljesen elvont elméleti konstrukcióknál használható az eredmény. Mivel a klasszikus eset része a kvantumosnak, legalábbis *léteznek* olyan esetek, amikor a határ használható.

Emellett a most használandó, aránylag kompakt jelölésmód – mivel speciális esetként a Fisher-információs határ is adódik – a többdimenziós Fisher-információnál is hasznunkra lehet.

Alkalmazhatjuk a 3.12 általános Cramér–Rao tételt. □

5.16. Megjegyzés. Az (R) feltételek fennállása esetén $A = \mathbf{1}_p$ választással a tétel kikötései teljesülnek és $f_{//_A\vartheta} = f_{//\vartheta} = l_{/\vartheta}$, vagyis a Fisher-információs határt kapjuk.

Hogy mindezt nem a Cramér–Rao-tétel egyszerű következményének, hanem önálló tételnek neveztük el, annak oka főleg a következő állításban rejlik.

5.17. Állítás. *Ha az $A = \left[\begin{array}{c:c} A_1 & A_2 \end{array}\right]$ blokkmátrix eleget tesz a tétel feltevéseinek, akkor az A-határ legalább akkora alsó becslést ad, mint az A_1-határ. Például ha az A mátrix első néhány oszlopa az identitás, akkor az A-határ erősebb a Fisher-információs határnál, vagy legalábbis azonos vele.*

Végezzük el a megfelelő blokkosítást minden használt mátrixra és vektorra, valamint $g_{//_{(\dots)}\vartheta}$ helyére írjunk $G_{(\dots)}$-t és az indexben szereplő A_i-k helyére írjunk i-t. Így

$$w_A(\vartheta, x) = \left[\begin{array}{c} w_1(\vartheta, x) \\ \hdashline w_2(\vartheta, x) \end{array}\right], \quad G_A = \left[\begin{array}{c:c} G_1 & G_2 \end{array}\right], \quad B_A = \left[\begin{array}{c:c} B_{11} & B_{12} \\ \hdashline B_{21} & B_{22} \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c:c} \operatorname{cov}_\vartheta(w_1, w_1) & \operatorname{cov}_\vartheta(w_1, w_2) \\ \hdashline \operatorname{cov}_\vartheta(w_2, w_1) & \operatorname{cov}_\vartheta(w_2, w_2) \end{array}\right].$$

Azt kell belátnunk, hogy $G_A B_A^{-1} G_A^\top \geq G_1 B_1^{-1} G_1^\top$. Legyen $B_{11\cdot 2} = B_{11} - B_{12} B_{22}^{-1} B_{21}$ és

$$C = \left[\begin{array}{c:c} \mathbf{1} & -B_{12}B_{22}^{-1} \\ \hdashline & \mathbf{1} \end{array}\right], \qquad B' = \left[\begin{array}{c:c} B_{11\cdot 2}^{-1} & \\ \hdashline & B_{22}^{-1} \end{array}\right],$$

így $G_A B^{-1} G_A^\top = G_A C^\top B'^{-1} C G_A^\top$, ugyanis némi számolással $B^{-1} = C^\top B'^{-1} C$. Ugyancsak könnyen ellenőrizhető, hogy

$$G_A C^\top = \left[\begin{array}{c:c} G_1 - G_2 B_{22}^{-1} B_{21} & G_2 \end{array}\right].$$

Mindezek alapján

$$G_A B_A^{-1} G_A^\top - G_1 B_1^{-1} G_1^\top = \big(G_1 - G_2 B_{22}^{-1} B_{21}\big) B_{11\cdot 2}^{-1} \big(G_1^\top - B_{12} B_{22}^{-1} G_2^\top\big).$$

A jobb oldal $M B_{11\cdot 2}^{-1} M^\top$ alakú, ezért pozitív szemidefinit, ha $B_{11\cdot 2}$ pozitív definit – ennek igazolásával tehát az állítást is igazoljuk.

Legyen $\left[\begin{array}{c} X \\ \hdashline Y \end{array}\right]$ normális eloszlású B varianciával. Ekkor az $Y \dashrightarrow X$ lineáris regresszió reziduális varianciája $B_{11\cdot 2}$, más megfogalmazásban $\boldsymbol{\Sigma}(X|Y) = B_{11\cdot 2}$. Mivel B pozitív definit, $B_{11\cdot 2}$ is az. □

5.18. Megjegyzés. A Bhattacharyya-határnál az élesség feltétele, hogy $\mathcal{P}$ exponenciális család és T a kitevőben szereplő statisztika legfeljebb A fokú polinomja, azaz minden ∂^A-nél magasabbrendű deriváltja 0. Lokális vizsgálódásoknál torzítatlanság helyett A rendben simuló várható érték is elég – a regularitási feltételek mellett –, az élesség karakterizációja viszont csak globálisan működik.[17]

5.19. Megjegyzés. Az A-határ aszimptotikusan teljesen elveszti előnyét a Fisher-információval szemben,[18] ugyanis a magasabbrendű deriváltak által nyert növelő tényezők $\frac{1}{n}$ arányosan magasabb hatványaival arányosan csökkennek n elemű független minta esetén.

[17] Illetve a nyílt halmazon előírt azonosság szinonímájaként értett lokalitás elég, de mi a lokális szót egyetlen kiválaszott pontbeli értékek és deriváltak vizsgálatára tartjuk fenn, így ezt „kisebb halmazon globálisnak” kell nevezzük.

[18] Ez nem is nagyon lehetne másképp, hiszen „elég szép” eloszláscsaládokra az aszimptotikus Fisher-információs határ elérhető.

5.4.2. A tenzorszorzat jelölésmódja

Mielőtt továbblépnénk, célszerű rögzíteni, milyen módon reprezentáljuk a tenzorszorzatot, így ugyanis áttekinthetőbben beszélhetünk majd róla. Mivel minden, amire a tenzorszorzat konstrukcióját alkalmazni fogjuk, mátrix vagy mátrix formájában megadható objektum – oszlopvektor, sorvektor, operátor – lesz, a műveletet elég mátrixokra megadni. A mátrix-reprezentáció persze szükségessé teszi, hogy minden szóba kerülő vektortéren előre rögzítsünk valamilyen (megszámlálható, jól-)rendezett bázist és ahhoz később ragaszkodjunk. A $\mathbb{K}$ test mindig $\mathbb{R}, \mathbb{C}$ valamelyike.

Az $A \otimes B$ tenzorszorzatot úgy kapjuk, hogy az A vektor minden egyes a eleme helyére aB-t írva blokkmátrixot készítünk belőle.[19] Annak tekintetében, hogy ez megfelel a tenzorszorzat definíciójának, ld. [Pet00].

Például ha a $\mathbb{K}$ test elemeit $\bullet$, a $\mathcal{V}$ Hilbert-tér elemeit $\square$ szimbolizálja, akkor $\mathbb{K}^{2\times 3} \otimes \mathcal{V}$ grafikus megjelenítése

$$\left(\begin{smallmatrix}\bullet&\bullet&\bullet\\ \bullet&\bullet&\bullet\end{smallmatrix}\right) \otimes \square = \begin{smallmatrix}\square&\square&\square\\ \square&\square&\square\end{smallmatrix} .$$

Jelölje e_i minden esetben azt az oszlopvektort, melynek i-edik eleme 1, minden más eleme 0, E_{ij} pedig azt a mátrixot, melynek (i,j) eleme 1, a többi nulla – azaz $E_{ij} = e_i e_j^* = e_i \otimes e_j^*$. Gyakran használjuk még az $\mathbf{1}_{k\times l} \otimes \mathrm{Tr}_{\mathcal{H}}$ leképezést, amely a $A \in \mathbb{R}^{k\times l} \otimes \mathrm{Lin}(\mathcal{H})$ egyes blokkjainak nyomaiból képez $\mathbb{K}^{k\times l}$-beli mátrixot.

Változónként lineáris és folytonos műveletek tenzorszorzatát az elemi tenzorokon úgy definiáluk, hogy az eredmény a komponensenként végzett műveletek eredményeiből képzett elemi tenzor legyen. Ezután lineárisan és folytonosan kiterjesztjük őket a teljes értelmezési tartományra.

Az egyszerűség kedvéért valós esetben az adjungálást transzponálásnak nevezzük majd és így is jelöljük.

A figyelmes olvasó felfedezheti, hogy gyakran a $(\,\cdot\,)^*$ adjungálás (transzponálás) helyett valójában a $(\,\cdot\,)^* \otimes \mathbf{1}_{\mathrm{Lin}\,\mathcal{H}}$ műveletet kell alkalmaznunk, de ezt már nem írjuk ki. Az egyértelműség kedvéért leszögezzük, hogy a tenzorszorzatra alkalmazott $(\,\cdot\,)^*$ (vagy $(\,\cdot\,)^\top$) jelölés mindig $(\,\cdot\,)^* \otimes \mathbf{1}$ jelölésére szolgál. Azaz, mátrixokban gondolkodva: a blokkok szerkezetét transzponáljuk, a blokkokat komplex esetben elemenként komplex konjugáljuk, de a blokkokon belül az elemek helyzetét nem változtatjuk meg. Ez a művelet általában nem azonos tenzorszorzat-térhez tartozó „természetes” adjungálás/transzponálás hozzárendeléssel,[20] de azt nem is fogjuk használni.

Amennyiben a tenzorszorzat-tér második komponensében négyzetes mátrixok vagy operátorok állnak, a szorzattér elemeinek szorzása alatt azt értjük, hogy a blokkszerkezetekre elvégezzük a mátrixszorzást úgy, hogy az ily módon összeszorzásra kerülő blokkokat a rajtuk értelmezett „$\cdot$” szorzással szorozzuk össze, vagyis $\cdot \triangleq \times \otimes \cdot$, ha „$\times$” jelöli a mátrixszorzást.

$$\begin{smallmatrix}\square&\square&\square\\ \square&\square&\square\end{smallmatrix} \cdot \begin{smallmatrix}\square&\square&\square&\square\\ \square&\square&\square&\square\\ \square&\square&\square&\square\end{smallmatrix} = \begin{smallmatrix}\square&\square&\square&\square\\ \square&\square&\square&\square\end{smallmatrix} \tag{5.20}$$

[19] Ez annak felel meg, hogy a megfelelő vektorterek báziselemeiből készített formális tenzorszorzatok (A prioritásával) lexikografikusan rendezett bázisában fejtjük ki a tenzorszorzatot.

[20] Az $(\,\cdot\,)^{*\otimes *}$ és az elemenkénti komplex konjugálás kompozíciója lenne, avagy komplex mátrixokra is használva a transzponálást: $(\,\cdot\,)^{*\otimes\top} \equiv (\,\cdot\,)^{\top\otimes *}$.

Továbbá $\mathbb{K}^{k\times m} = \mathbb{K}^{k\times m} \otimes \mathbb{K}$ elemével úgy szorozzuk meg $\mathbb{K}^{m\times l} \otimes \mathcal{V}$ elemét, hogy a mátrixszorzás szabályai szerint összeszorzandó elemeken a $(\mathbb{K}, \mathcal{V}) \to \mathcal{V}$ szorzással szorozzuk össze.

Végül: ha valami egyszerűen egy $\mathbb{K}$ feletti $\mathcal{V}$ Hilbert-tér eleme, de nekünk kéttényezős skalárszorzat alakjában van rá szükségünk, akkor $\mathbb{K} \otimes \mathcal{V}$ elemeként kezeljük.

Fontos, hogy minden művelet, amit így létrehoztunk, a megfelelő tényezőkben szereplő, elemi tenzor alakú elemeken ($A = a \otimes v$) tényezőnként elvégezhető „természetes" művelet folytonos lineáris lezárása. Ezért minden folytonosság, linearitás és asszociativitás, aminek egyáltalán értelme van, teljesül.

5.4.3. *Obszervábilis többdimenziós méréshez*

Ezek után az $M : \mathcal{H} \rightsquigarrow \mathbb{R}^k$ (minden állapotban) véges szórású méréshez tartozó obszervábilis:

$$X_M \triangleq \int_{\mathbb{R}^k} x \otimes M(\mathrm{d}^k x) = \sum\nolimits_i e_i \otimes X_i \qquad \in \mathbb{R}^k \otimes \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S) \underset{k=3}{=} \begin{array}{c} \boxed{\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)} \\ \boxed{\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)} \\ \boxed{\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)} \end{array} \text{, ahol}$$

$$X_i \triangleq \int_{\mathbb{R}^k} x_i \, M(\mathrm{d}^k x) \,,$$

Amennyiben a marginális mérések kompatibilisek és M ezek együttes mérése, vagyis $M_i(\mathrm{d}x_i) = M(\dots, \mathbb{R}, \mathrm{d}x_i, \mathbb{R}, \dots)$-re $M(\mathrm{d}^k x) = \prod_i M_i(\mathrm{d}x_i)$ – erre vezessük be a teljesen házi $M = \bigtimes M_i$ jelöléset –, akkor

$$X_i = \int_{\mathbb{R}} M_i(\mathrm{d}x_i) \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S) \,.$$

A mérési eredmény kimeneteli eloszlása az $S \in \mathfrak{S}(\mathcal{H})$ állapothoz természetesen továbbra is

$$\mathbf{P}^M_S\big(\mathrm{d}^k x\big) = \operatorname{Tr} S M(\mathrm{d}^k x) \,,$$

az előbb említett speciális esetben pedig

$$\mathbf{P}^{\bigtimes M_i}_S\big(\mathrm{d}^k x\big) = \prod\nolimits_i \operatorname{Tr} S M_i(\mathrm{d}x_i) \,.$$

Végül a várható érték képletei:

$$\mathbf{E}_S(M) = (\mathbf{1}_k \otimes \operatorname{Tr})(X_m S) = \sum\nolimits_i e_i \cdot \operatorname{Tr}(X_i S) \,.$$

5.4.4. *Skalárszorzat tenzoráltja*

Még egy, kifejezetten technikai és jelölés-rövidítő célú fogalmat vezetünk be.

5.20. Definíció. Legyen adott a $\big(\mathcal{H}, \langle\cdot|\cdot\rangle\big)$ Hilbert-tér a $\mathbb{K}$ tér felett. Ennek tenzoráltja alatt – legalábbis e dolgozat keretein belül – azt a $\langle\langle\cdot||\cdot\rangle\rangle$ bilineáris leképezést értjük, amely az $A \in \mathbb{K}^{m\times k}\otimes\mathcal{H}$, $A \in \mathbb{K}^{m\times l}\otimes\mathcal{H}$ párhoz azt az $\langle\langle A||B\rangle\rangle \in \mathbb{K}^{k\times l}$-t rendeli, melyet az A^* és B blokkmátrixok összeszorzásával kapunk, ha az egyes blokkokat a $\langle\cdot|\cdot\rangle$ skaláris szorzással szorozzuk össze.[21] Azaz

$$\langle\langle A||B\rangle\rangle = \big((\cdot^* \times \cdot) \otimes \langle\cdot|\cdot\rangle\big)(A, B) \in \mathbb{K}^{k\times l} \quad \big(A \in \mathbb{K}^{m\times k} \otimes \mathcal{H},\ B \in \mathbb{K}^{m\times l} \otimes \mathcal{H}\big) \,,$$

$$\langle\langle \begin{smallmatrix} \square & \square & \square \\ \square & \square & \square \end{smallmatrix} \,||\, \begin{smallmatrix} \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square \end{smallmatrix} \rangle\rangle = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

[21] Első látásra ugyanennyire lenne kényelmes, ha A-t nem transzponálnánk a szorzás előtt, hanem rögtön $\mathbb{K}^{k\times m}$ elemeként adnánk meg, hogy tudjunk mátrix-szorozni. A fő érv a használt változat mellett az, hogy így $\langle\langle A||A\rangle\rangle$ mindig értelmes és a tényezők felcserélése az eredmény adjungálását eredményezi, azaz formailag a skalárszorzatra jobban hasonlító objektumot kapunk. Emellett „filozófiájában" az egyes blokkokban lévő $\mathcal{V}$-beli elemeknél is az adjungálásnak/transzponálásnak felel meg az, hogy $\langle\cdot|\cdot\rangle$ első argumentumába kerülnek, erről szól a Dirac-féle jelölésmód.

ahol „$\times$" a $\mathbb{K}^{k\times m} \times \mathbb{K}^{m\times l} \to \mathbb{K}^{k\times l}$ mátrixszorzás.[22][23] Speciálisan ha $A = a \otimes u$ és $B = b \otimes v$, akkor $\langle\langle A||B\rangle\rangle = (a^* \times b) \otimes \langle u|v\rangle$, ami egyszerűen az a^*b mátrix megszorozva az $\langle u|v\rangle$ skalárral.

A konstrukció két alapvető jellemzője a pozitivitás és – speciális esetben – a reprezentálhatóság.

5.21. Állítás. $\langle\langle A||A\rangle\rangle$ *pozitív szemidefinit.*

Azt kell belátnunk, hogy $A \in \mathbb{K}^{m\times k} \otimes \mathcal{V}$, $s \in \mathbb{K}^{k\times 1}$ esetén $s^*\langle\langle A||A\rangle\rangle s \geq 0$.

Vizsgáljuk meg közelebbről $s^*\langle\langle A||$-t mint $\mathbb{K}^{m\times 1} \otimes \mathcal{V} \longrightarrow \mathbb{K}^{k\times 1} \otimes \mathcal{V} \longrightarrow \mathbb{K}$ funkcionált. Ez Riesz-reprezentálható alkalmas $a \in \mathbb{K}^{m\times 1} \otimes \mathcal{V}$ elemre $\langle\langle a||$ alakban. Szemléltetve $k = 2$, $m = 3$ esetére: $(\bullet\,\bullet)\begin{smallmatrix}\square&\square&\square\\ \square&\square&\square\end{smallmatrix} = \square\,\square\,\square$. Az $||A\rangle\rangle s$ objektumnak nyilván megfeleltethető ugyanazon a-val $||a\rangle\rangle \in \mathbb{K}^{m\times 1} \otimes \mathcal{V}$, így $s^*\langle\langle A||A\rangle\rangle s = \langle a|a\rangle \geq 0$. $\square$

A fő lépés formálisan még kompaktabban felírható: $a = s^*\langle\langle A|| = (\mathbf{L}_s \otimes \mathbf{1}_{\mathcal{V}})(A) \in \mathbb{K} \otimes \mathcal{V}$. Ennél már csak az rövidebb, ha a végtelen sok bevezetett jelölésbeli konvenciót és természetes azonosítást kihasználva annyit írunk, hogy $s^*\langle\langle A||A\rangle\rangle s = \langle As|As\rangle \geq 0$. Az előző két számolási mód akár példaképp szolgálhat arra, hogy ilyesféle rövidítések hogyan értelmezhetőek.

5.22. Állítás. *Amennyiben a fenti felírásnál $k = m = 1$, továbbá adott egy $\Lambda : \mathbb{K} \otimes \mathcal{H} \to \mathbb{K}^{1\times l}$ folytonos lineáris leképezés, akkor egyértelműen létezik olyan $L \in \mathbb{K}^{1\times l} \otimes \mathcal{H}$ elem, hogy $\Lambda \equiv \langle\langle L||\cdot\rangle\rangle$.*

Vegyük észre, hogy ez egy trivialitás (csak pont erre a megfogalmazásra lesz szükségünk). Annyiról van szó, hogy a $\Lambda = \sum_i e_i^* \otimes \Lambda_i$ koordinátákra bontásnál minden egyes $\Lambda_i : e_i^*\mathcal{H} \to e_i\mathbb{K}$, vagyis $\mathcal{H} \to \mathbb{K}$ lineáris leképezést reprezentálunk a megfelelő L_i-vel, majd az $L = \sum_i e_i^* \otimes L_i$ képlet szerint összerakjuk. $\square$

A legfontosabb tulajdonság azonban a Cauchy-egyenlőtlenség tenzorált változata:

5.23. Állítás. *Legyen $\langle\langle\cdot||\cdot\rangle\rangle$ a $\mathcal{V}$ feletti $\langle\cdot|\cdot\rangle$ tenzoráltja és legyenek $A \in \mathbb{K}^{m\times k} \otimes \mathcal{V}$, $B \in \mathbb{K}^{m\times l} \otimes \mathcal{V}$ a tenzorált skalárszorzat szerint összeszorozható elemek, valamint $\langle\langle B||B\rangle\rangle$ nem-elfajuló. Ekkor az önadjungált mátrixok rendezése értelemben*

$$\langle\langle A||A\rangle\rangle \geq \langle\langle A||B\rangle\rangle\langle\langle B||B\rangle\rangle^{-1}\langle\langle B||A\rangle\rangle\,. \tag{5.21}$$

Azt kell belátnunk, hogy tetszőleges $s \in \mathbb{K}^{k\times 1}$ vektorra

$$s^*\langle\langle A||A\rangle\rangle s \geq s^*\langle\langle A||B\rangle\rangle\langle\langle B||B\rangle\rangle^{-1}\langle\langle B||A\rangle\rangle s \qquad \big(A \in \mathbb{K}^{m\times k} \otimes \mathcal{V},\ B \in \mathbb{K}^{m\times l} \otimes \mathcal{V}\big)\,.$$

A pozitivitás bizonyításával analóg módon $a = As \in \mathbb{K}^{m\times 1}$ választással elég azt igazolnunk, hogy

$$\langle\langle a||a\rangle\rangle \geq \langle\langle a||B\rangle\rangle\langle\langle B||B\rangle\rangle^{-1}\langle\langle B||a\rangle\rangle \qquad \big(a \in \mathbb{K}^{m\times 1} \otimes \mathcal{V},\ B \in \mathbb{K}^{m\times l} \otimes \mathcal{V}\big)\,.$$

$$\left\langle\left\langle \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \middle|\middle| \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \right\rangle\right\rangle \geq \left\langle\left\langle \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \middle|\middle| \begin{smallmatrix}\square&\square\\ \square&\square\\ \square&\square\end{smallmatrix} \right\rangle\right\rangle \begin{pmatrix}\bullet&\bullet\\ \bullet&\bullet\end{pmatrix}^{-1} \left\langle\left\langle \begin{smallmatrix}\square&\square\\ \square&\square\\ \square&\square\end{smallmatrix} \middle|\middle| \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \right\rangle\right\rangle$$

$$\left\langle\left\langle \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \middle|\middle| \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \right\rangle\right\rangle \geq \left\langle\left\langle \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \middle|\middle| \begin{smallmatrix}\square&\square&\square\\ \square&\square&\square\\ \square&\square&\square\end{smallmatrix} \middle|\middle| \begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \right\rangle\right\rangle$$

Ez már két $\mathbb{K}$-beli szám. Ha a helyébe bármely blokkját írva az állítás teljesül, akkor magára a-ra is fennáll, hiszen a komponensekre vonatkozó egyenlőtlenségek összege épp az eredeti relációt adja. Feltehejük tehát, hogy $a \in \mathcal{V}$:

$$\langle a|a\rangle \geq \langle\langle a||B\rangle\rangle\langle\langle B||B\rangle\rangle^{-1}\langle\langle B||a\rangle\rangle \qquad \big(a \in \mathcal{V},\ B \in \mathbb{K}^{m\times l} \otimes \mathcal{V}\big)\,.$$

[22] $(\cdot^* \times \cdot)$ az első argumentum adjungáltjából (transzponáltjából) és a második argumentumból képzett szorzatmátrixot eredményező művelet.

[23] Például ha $k = l$ és $m = 1$, akkor egyszerűen $\mathbb{K}^k$ és $\mathcal{V}$ tenzorszorzatának skalárszorzat-műveletét kapjuk, hiszen $\mathbb{K}^k$ felett a skalárszorzat épp $(\cdot^* \times \cdot)$.

Amennyiben a bal oldal 0, úgy $a = 0$ és a jobb oldal is 0 és kész vagyunk. Bátran feltehetjük hát, hogy $\|a\| \neq 0$. Szorozzunk balról $\langle\langle b||u\rangle\rangle$-val, jobbról pedig $\langle\langle u||b\rangle\rangle$-vel. Ez megőrzi a rendezést, hiszen e két mátrix egymás adjungáltja.

$$\langle a|a\rangle \, \langle\langle B||a\rangle\rangle\langle\langle a||B\rangle\rangle \geq \langle\langle B||a\rangle\rangle\langle\langle a||B\rangle\rangle\langle\langle B||B\rangle\rangle^{-1}\langle\langle B||a\rangle\rangle\langle\langle a||B\rangle\rangle \quad \big(a \in \mathcal{V},\, B \in \mathbb{K}^{m\times l} \otimes \mathcal{V}\big)\,.$$

Ha a $C \triangleq \langle\langle B||a\rangle\rangle\langle\langle a||B\rangle\rangle \cdot \langle a|a\rangle^{-1}$ pozitív szemidefinit mátrix nem nagyobb, mint $D \triangleq \langle\langle B||B\rangle\rangle$, akkor $C \geq CD^{-1}C$ és készen vagyunk. Már elég annyit belátnunk, hogy

$$\langle a|a\rangle \, \langle\langle B||B\rangle\rangle \geq \langle\langle B||a\rangle\rangle\langle\langle a||B\rangle\rangle\,.$$

A szokásos trükkel ezt berakhatjuk $t^*(\dots)t$ közé és visszajátszhatjuk egy $b \in \mathcal{V}$-ra felírt

$$\langle a|a\rangle \, \langle b|b\rangle \geq \langle b|a\rangle \, \langle a|b\rangle$$

egyenlőtlenségre. Ez épp a nem-tenzorált Cauchy-egyenlőtlenség. □

5.4.5. *A kvantum A-határ*

Tekintsünk egy $\mathcal{S} = \{S_\vartheta | \vartheta \in \Theta\} \quad \big(\Theta \subseteq \mathbb{R}^k\big)$ állapotcsaládot. Tegyük fel, hogy a $\vartheta \mapsto S_\vartheta$ leképezés sokszor differenciálható, $A \in \mathbb{N}^{p\times l}$ legyen olyan, mint a klasszikus esetben. A $\mathcal{V}$ Hilbert-tér – ez vagy $\mathbb{R}^k$, vagy egy operátortér lesz – ϑ-tól sokszor differenciálhatóan függő v elemének $\partial^A v$ deriváltja alatt azt az $\mathbb{R}^{1\times l} \otimes \mathcal{V}$-beli elemet értük, melynek komponensei rendre a $\partial^{a_j} v \in \mathcal{H}$ értékek. Jelölésben

$$\partial^A v \triangleq \sum\nolimits_j e_j^\top \otimes \partial^{a_j} v \quad \in \mathbb{R}^{1\times l} \otimes \mathcal{V} \qquad \big(v \in \mathcal{V},\, A \in \mathbb{N}^{p\times l} = \mathbb{R}^p \otimes \mathbb{R}^{1\times l},\, A = \textstyle\sum_j a_j \otimes e_j^\top\big). \tag{5.22}$$

Most is használni fogjuk a $v_{/\!A\vartheta} \triangleq \partial^A v$ jelölést. Az ábrákat a $k = 2$, $l = 3$ esethez készítjük.

Tegyük fel a következőket:

(i) Az $S : \Theta \to \mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$ leképezés A rendben folytonosan differenciálható, vagyis $S_{/\!A\vartheta} \in \mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$ létezik és folytonos ϑ-ban.

(ii) Az $\mathbf{E}_\vartheta(\mathbf{1}_{\mathcal{H}}) \equiv 1$ várható értékbe A rendben be lehet deriválni, vagyis
$$\operatorname{Tr} S_{/\!A\vartheta} = \partial^A(1) = \mathbf{0}_{1\times l}\,.$$

(iii) A korlátos X operátorokon értelmezett $X \longmapsto (\mathbf{1}_{1\times l} \otimes \operatorname{Tr}) X S_{/\!A\vartheta} \in \mathbb{R}^{1\times l}$ leképezés folytonosan kiterjeszthető az $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S_\vartheta)$ térre, azaz $\exists c \in \mathbb{R}$:
$$\big\|(\mathbf{1}_{1\times l} \otimes \operatorname{Tr}) X S_{/\!A\vartheta}\big\|^2 \leq c \cdot \operatorname{Tr} S_\vartheta X^2 \qquad \big(X \in \mathfrak{B}(\mathcal{H})\big)\,.$$
Legyen $S_{/\!/\!A\vartheta} \in \mathbb{R}^{1\times l} \otimes \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S_\vartheta)$ ezen funkcionál Riesz-reprezentációja a $\big((\,\cdot\,||\,\cdot\,)\big)_{S_\vartheta}$ tenzorált skaláris szorzatra nézve. A reprezentáció definiáló egyenlete a következő.
$$(\mathbf{1}_{1\times l} \otimes \operatorname{Tr}) X S_{/\!A\vartheta} = (\mathbf{1}_{1\times l} \otimes \operatorname{Tr})\big(\tfrac{1}{2}(S_\vartheta X + X S_\vartheta) \cdot S_{/\!/\!A\vartheta}\big) \qquad \big(X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\big) \tag{5.23}$$
$$(\bullet\bullet\bullet) = (\mathbf{1} \otimes \operatorname{Tr}) \left[\, \square \;\cdot\; \square\,\square\,\square \,\right]$$
Ezt a Hilbert–Schmidt skaláris szorzat tenzoráltja segítségével lerövidíthetjük:
$$\big\langle\langle X \big|\big| S_{/\!A\vartheta}\big\rangle\rangle_2 = \big(\big(X \big|\big| S_{/\!/\!A\vartheta}\big)\big)_S \qquad \big(X \in \mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)\big) \tag{5.24}$$

(iv) Az alábbi mátrix véges és nem-elfajuló.
$$B_A(\vartheta) = (\mathbf{1}_{l\times 1} \otimes \operatorname{Tr})(S^\top_{/\!/\!A\vartheta} S_\vartheta S_{/\!/\!A\vartheta}) \;\; = \big(\big(S_{/\!/\!A\vartheta} \big|\big| S_{/\!/\!A\vartheta}\big)\big)_\vartheta$$
$$\left(\begin{smallmatrix}\bullet&\bullet&\bullet\\ \bullet&\bullet&\bullet\\ \bullet&\bullet&\bullet\end{smallmatrix}\right) = (\mathbf{1} \otimes \operatorname{Tr}) \left[\begin{smallmatrix}\square\\ \square\\ \square\end{smallmatrix} \;\cdot\; \square \;\cdot\; \square\,\square\,\square\right] = \big(\big(\,\square\,\square\,\square \,||\, \square\,\square\,\square\,\big)\big)_\vartheta$$

(v) Az $M(\mathrm{d}^k x) : \mathcal{H} \rightsquigarrow \mathbb{R}^k$ mérés minden $S_\vartheta$nbh-ban véges szórású, várható értékére pedig teljesül az A rendű bederiválhatóság. Jelölje a várható értéket $g(\vartheta)$, ekkor a bederiválhatósági feltétel:
$$g_{/\!A\vartheta} = \partial^A g(\vartheta) = \partial^A\big((\mathbf{1}_{k\times l} \otimes \operatorname{Tr})(X_M S_\vartheta)\big) \underset{\triangle}{=} (\mathbf{1}_k \otimes \operatorname{Tr})(X_M S_{/\!A\vartheta})\,.$$
$$\left(\begin{smallmatrix}\bullet&\bullet&\bullet\\ \bullet&\bullet&\bullet\end{smallmatrix}\right) = \partial^A\left(\begin{smallmatrix}\bullet\\ \bullet\end{smallmatrix}\right) \;= \partial^A(\mathbf{1} \otimes \operatorname{Tr}) \left[\begin{smallmatrix}\square\\ \square\end{smallmatrix} \;\cdot\; \square\right] \qquad = (\mathbf{1} \otimes \operatorname{Tr}) \left[\begin{smallmatrix}\square\\ \square\end{smallmatrix} \;\cdot\; \square\,\square\,\square\right]$$

5.24. Tétel (kvantum A-határ). *A fenti feltételek teljesülése esetén*

$$\mathbf{\Sigma}_\vartheta(M) \geq g_{/\!A\vartheta} B_A(\vartheta)^{-1} g_{/\!A\vartheta}^\top \,. \tag{5.25}$$

Az (v) feltétel szerint $g_{/\!A\vartheta} = \langle\langle X_M \big| \big| S_{/\vartheta} \rangle\rangle_2$, ami (5.24) alapján $\big((X_M \big| \big| S_{//\!A\vartheta})\big)_\vartheta$. Másrészt nyilván $\mathbf{\Sigma}_\vartheta(M) = ((X_M || X_M))_\vartheta$. Ezért a tétel állítása épp egy tenzorált Cauchy-egyenlőtlenség:

$$((X_M || X_M))_\vartheta \geq \big((X_M \big| \big| S_{//\!A\vartheta})\big)_\vartheta \big((S_{//\!A\vartheta} \big| \big| S_{//\!A\vartheta})\big)_\vartheta^{-1} \big((S_{//\!A\vartheta} \big| \big| X_M)\big)_\vartheta \,. \quad \square$$

5.25. Megjegyzés. Az (5.24) képletből könnyen kiolvasható, hogy $S_{//\!A\vartheta} = (\mathbf{1}_{1\times l} \otimes \mathbf{J}_S^{-1}) S_{/\!A\vartheta}$. Ez egyrészt azt jelenti, hogy magasabbrendű A-határok megadásánál nem jelentősen nehezebb feladat, mint az alacsonyabb rendűek esete, hiszen egyetlen $\mathbf{J}_S^{-1}$ szuperoperátort kell megadnunk, amelyet aztán minden egyes $S_{//\!a_j\vartheta}$ parciális deriváltra alkalmazunk. Másrészt azt, hogy magasabbrendű regularitás esetén a kovariancia és Fisher-információ általánosításaihoz természetes módon tudjuk definiálni a megfelelő A-határt, csak $\mathbf{J}_S$ képletét kell a megfelelő metrikák szerint választani.

5.26. Megjegyzés. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy a paramétert igyekszünk becsülni. Nyilván az A-határ két oldala közé is közbeékelhetjük a megfelelő Braunstein–Caves típusú határt a kvantum-A-határ és a mérés kimeneteli eloszlásának klasszikus A-határa közt, amely a globális elérhetőség karakterizációjánál segíthet. A Braunstein–Caves határ globális elérhetőségének bizonyítása szinte változtatás nélkül átemelhető, hiszen a regularitási feltételek miatt a deriválásokat itt is végezhetjük akár az állapotra, akár a kimenetel sűrűségfüggvényére.

A Bhattacharyya-határ klasszikus globális elérhetőségi feltételével együtt azt a feltételt kapjuk, hogy a család exponenciális, mégpedig a szimmetrikus típus alábbi általánosítása:

$$S_\vartheta = e^{\beta(\vartheta)} \exp\left\{\tfrac{1}{2}\gamma_r(X) a_r(\vartheta)\right\} S_0 \exp\left\{\tfrac{1}{2}\gamma_r(X) a_r(\vartheta)\right\} \,,$$

ahol a felcserélhető T_r operátorokat rögtön egyetlen operátor valós függvényeiként írtuk fel, az $a_r(\vartheta)$ függvények pedig mind olyan polinomjai ϑ koordinátáinak, melyek A-deriváltja konstans.

A. Függelék

A.1. Technikai kiegészítések

Megadunk néhány fogalmat, tulajdonságot és tételt, melyekre a fő részben hivatkoztunk.

A.1.1. Spektráltétel szimmetrikus operátorokra

A.1. Tétel. *Sűrűn értelmezett, szimmetrikus X operátornak létezik spektrálmértéke, vagyis olyan $M(\mathrm{d}x)$ – nem feltétlenül ortogonális – egységfelosztás, amelyre*

(i) $$\mathcal{D}(X) \subseteq \left\{\psi \in \mathcal{H} \middle| \int x^2 \langle\psi|M(\mathrm{d}x)|\psi\rangle < \infty\right\} ,$$

(ii) $$\langle\psi|X|\psi\rangle = \int x\langle\psi|M(\mathrm{d}x)|\psi\rangle \qquad \big(\psi \in \mathcal{D}(X)\big) ,$$

(iii) $$\|X\psi\|^2 = \int x^2\langle\psi|M(\mathrm{d}x)|\psi\rangle \qquad \big(\psi \in \mathcal{D}(X)\big) .$$

Továbbá amennyiben X maximális szimmetrikus, akkor az (i) pontban egyenlőség is írható és úgy M egyértelmű. Ha pedig X (lényegében) önadjungált, akkor M PProM és viszont. X pontosan akkor korlátos, ha M korlátos tartójú.

Az az $\mathfrak{L}^2(\mathbb{R}_+)$ feletti P_+ operátor, mely a független változóval szorozza a függvénytér elemeit, példa rá, hogy M egy szimmetrikus operátor esetén sem feltétlenül PProM. Az $\mathfrak{L}^2(a,b)$ felett hasonlóan definiált önadjugált operátor pedig arra példa, a spektrum lehet akár egy teljes intervallum is anélkül, hogy az oprerátor egyetlen sajátvektorral rendelkezne.

A.1.2. Teljesen pozitív szuperoperátorok

A.2. Definíció. A $\mathbf{T} : \mathfrak{B}(\mathcal{H}) \to \mathfrak{B}(\mathcal{K})$ pozitív lineáris leképezés *teljesen pozitív*, ha bármely $\mathcal{L}$ Hilbert-térre és $B \in \mathbb{SA}_{\oplus}(L)$ elemre az $A \otimes B \mapsto \mathbf{T}(A) \otimes B$ leképezés pozitív.

A.3. Állítás. A $\mathbf{T} : \mathfrak{B}(\mathcal{H}) \to \mathfrak{B}(\mathcal{K})$ lineáris leképezés pontosan akkor teljesen pozitív, ha

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_i^*\mathbf{T}(b_i^*b_j)a_j \geq 0 \qquad \big(n \in \mathbb{N},\, a_i \in \mathcal{K}, B_i \in \mathcal{H}\big) . \tag{A.1}$$

Továbbá ha $\mathbf{T}$ teljesen pozitív, akkor teljesíti a Schwarz-egyenlőtlenséget:

$$\mathbf{T}(A^*A) \geq \mathbf{T}(A^*)\mathbf{T}(A) .$$

A.4. Példa. Az $A \mapsto A^*$ leképezés pozitív $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$-n, de nem teljesen pozitív: $\mathcal{L} = \mathcal{H}$ esetén a tenzorszorzatra való kiterjesztésnél $A^* \otimes A - A \otimes A^*$ képe önmaga ellentettje.

A teljes pozitivitás és a pozitivitás közti eltérés a fenti példán is látható módon az, hogy a nem-önadjungált mátrixokon felvett értékeket, a „nem átlós elemekre” gyakorolt hatást is korlátozza. Némi fantáziával azt mondhatjuk, hogy a kvantum-sztochasztikus leképezéseknél a pozitivitás a teljes pozitivitás „klasszikus” megfelelője lenne, ezért is nem elégszünk meg vele.

A.2. Jelölések és konvenciók

Mivel az irodalomban messze nem egységesen használatosak a különféle szimbólumok, felsorolom, hogy a dolgozatban mely jelölésekhez igyekeztem tartani magamat.

- $\overset{\triangle}{=}$ definiáló egyenletet, értékadást, avagy – egyéb $\overset{\triangle}{*}$ alakú jelekkel együtt – a definíció szerint, illetve abból közvetlenül adódó relációt jelöl.
- $\underset{\triangle}{*}$ egy állítás többtagú képletként történő felírásánál az átalakítások, nyilvánvaló vagy már igazolt relációk közül emeli ki a lényeget jelentőt, amennyiben ez várhatóan javítja az áttekinthetőséget.
- $\langle\phi|\psi\rangle$ jelöli egy Hilbert-térben a skaláris szorzást, $|\psi\rangle$ a $\psi \in \mathcal{H}$ elemet és $\langle\phi|$ a $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$, $\psi \mapsto \langle\phi|\psi\rangle$ lineáris funkcionált, így $\forall z \in \mathbb{C} : z \cdot \langle\phi| = \langle\bar{z}\cdot\phi|$. A $\langle\phi|X|\psi\rangle$ „szendvics" a $\langle\phi|X\psi\rangle = \langle X^*\phi|\psi\rangle$ értéket jelöli.
- A $\mathcal{H}$ Hilbert-tér operátor-osztályai:

  $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$, $\mathfrak{B}_{\mathbb{R}}(\mathcal{H})$ – Korlátos, korlátos önadungált operátorok.

  $\mathfrak{F}(\mathcal{H})$ – Véges rangúak.

  $\mathfrak{P}(\mathcal{H})$ – Projektorok. Ezek az önadjungált operátorok szokásos rendezésével (ortomoduláris σ-) hálót alkotnak, mely természetes módon izomorf a megfelelő zárt alterek tartalmazás szerint rendezett hálójával. A nemkommutatív valószínűségszámításban általában projektorháló adja az eseményalgebra megfelelőjét – mindez a Neumann-féle mérések elméletével van szoros kapcsolatban, hiszen egy esemény lényegében egy 0–1 értékű valószínűségi változó avagy mérés.

  Projektor alatt ortogonális projekciót értünk, azaz $P = P^2 = P^*$ tulajdonságú operátort.

  $\mathbb{SA}(\mathcal{H})$, $\mathbb{SA}_{\oplus}(\mathcal{H})$ – Önadjungáltak, pozitív önadjungáltak. Nem feltétlenül követeljük meg, hogy korlátosak legyenek, sőt, esetleg a lényegében önadjungált operátorokat is megengedjük.

  $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$ – 1 nyomú pozitív operátorok, avagy statisztikus/sűrűségi operátorok. $\vec{\mathfrak{S}}(\mathcal{H})$ ezen belül a tiszta állapotokat reprezentáló, azaz $|\psi\rangle\langle\psi|$ $\left(\|\psi\|^2 = 1\right)$ alakú elemek halmaza. $\mathfrak{S}^\circ(\mathcal{H})$ a topologikus határ, $\mathfrak{S}^\bullet(\mathcal{H})$ a hű állapotok halmaza.

  $\mathfrak{T}^1(\mathcal{H})$, $(\mathfrak{T}^1_{\mathbb{R}}(\mathcal{H}))$, $\mathfrak{T}^2(\mathcal{H})$ $(\mathfrak{T}^2_{\mathbb{R}}(\mathcal{H}))$ – (Önadjungált) nyomoperátorok / Hilbert–Schmidt operátorok.

  $\mathfrak{U}(\mathcal{H})$ – Unitér operátorok.

  $\mathfrak{L}^2(S)$, $\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(S)$ – Az S kvantumállapotra nézve négyzetesen összegezhető (szimmetrikus) operátorok tere. Ezt mindig a megfelelő Hilbert-tér topológiával tekintjük. Definiálhatnánk általános $\mathfrak{L}^p(S)$ tereket is és ezek közt megfogalmazhatnánk a megfelelő dualitásokat, de statisztikai szempontból a négyzetesen összegezhetőeknek van jelentős szerepe.

  Mindezek felett a következő topológiákat definiáljuk:

  $(\mathbf{u})$ – egyenletes, avagy uniform topológia: $A = {}^{(\mathbf{u})}\lim_n A_n$ ha $\lim_n \|A_n - A\| = 0$;

  $(\mathbf{s})$ – erős, pontonkénti limesz topológia: $A = {}^{(\mathbf{s})}\lim A_n$ ha $\forall x \in \mathcal{H} : \lim_n \|A_n x - Ax\| = 0$;

  $(\mathbf{w})$ – gyenge topológia: $A = {}^{(\mathbf{w})}\lim A_n$ ha $\forall x, y \in \mathcal{H} : \lim \langle x|A_n - A|y\rangle = 0$.

  Az önadjungált operátorokra szorítkozva az $A_n \xrightarrow{(\mathbf{w})} A$ gyenge konvergenciához a polarizációs képlet szerint elegendő $\forall x \in \mathcal{H} : \langle x|A_n - A|x\rangle = 0$, így pozitív operátorokra ekvivalens az $A_n^{1/2} \xrightarrow{(\mathbf{s})} A^{1/2}$ konvergenciával. Továbbá önadjungált operátorok monoton sorozatára a gyenge és erős konvergencia azonos.

  Más jelölés hiányában $\mathfrak{B}(\mathcal{H})$-t az erős topológiával ellátva tekintjük (pl. integrálok, összegek konvergenciájánál).

– Mérések, műszerek

$\mathcal{H} \rightsquigarrow (\mathcal{X}, \mathcal{A})$ – olyan mérés vagy kvantum-műszer, mely a $\mathcal{H}$ Hilbert-tér sűrűségoperátorain értelmezett és a mért érték $\mathcal{X}$-beli. (Azaz egy $(\mathcal{X}, \mathcal{A})$ feletti valószínűségi mérték értékű, $\mathfrak{S}(\mathcal{H})$-n értelmezett affin leképezés húzódik a jelölés mögött.)

$\mathfrak{M}^{\mathcal{X}}(\mathcal{H})$ – Az $M : \mathcal{H} \rightsquigarrow \mathcal{X}$ mérések halmaza.

$\mathbf{P}_S^M(A)$ – Azon esemény valószínűsége, hogy az S állapotban elvégzett M mérés eredménye az A mérhető halmazba esik.

$\mathbf{E}_S(M)$, $\mathbf{E}_S(X)$ – Az S állapotban az M mérés illetve az X obszervábilis várható értéke. A szórásnégyzet $\mathbf{D}_S^2(M)$ illetve $\mathbf{D}_S^2(X)$. A kovariancia-mátrix $\mathbf{\Sigma}_\vartheta(M)$.

– $\mathcal{D}(X)$ illetve $\mathcal{R}(X)$ jelöli az X operátor értelmezési tartományát illetve képterét.

– $A \circ B \triangleq \frac{1}{2}(AB + BA)$ az A és B önadjungált operátorok Jordan-szorzata.

– $\mathbf{L}_a$ és $\mathbf{R}_a$ az a-val balról illetve jobbról történő szorzás művelete.

– A „megszámlálhatóan sok” megfogalmazásba a véges számosságokat is beleértjük.

– A $\sqsubseteq$ jelölés nincs használatban, e pontban a megtisztelő figyelmet köszönöm meg.

– $\forall^{(\lambda)}(\,\cdot\,)$ jelentése: „λ-mm. $(\,\cdot\,)$ esetén”.

– $z = \operatorname{Re} z + \mathrm{i} \cdot \operatorname{Im} z$.

– $\mathfrak{L}^2(\,\cdot\,)$ ($\mathfrak{L}^2_{\mathbb{R}}(\,\cdot\,)$) az argumentumban szereplő mértékre nézve négyzetesen integrálható komplex (valós) értékű függvények tere (kivéve persze, ha az argumentum egy sűrűség-operátor, ld. fent).

– $[\![x_{jk}]\!]$ az x_{jk} elemek alkotta mátrix.

– $(\,\cdot\,)_{/\vartheta} \triangleq \frac{\partial}{\partial\vartheta}(\,\cdot\,)$ és $(\,\cdot\,)_{//\vartheta} \triangleq \frac{\partial}{\partial\vartheta}\log(\,\cdot\,) = \frac{\partial(\,\cdot\,)}{(\,\cdot\,)\,\partial\vartheta}$.

– δ_{jk} (vagy $\delta_x(y)$) a Dirac-féle delta (függvény), azaz az argumentumok egyezőségének indikátora – értéke 1, ha a két argumentum azonos, egyébként 0.

– Az $(\mathcal{M}, g)$ Riemann-sokaság z eleméhez tartozó érintőtér $T_z\mathcal{M}$, ennek metrikus tenzora $\langle\,\cdot\,|\,\cdot\,\rangle_{T_z g}$ vagy röviden $\langle\,\cdot\,|\,\cdot\,\rangle_g$.

Irodalom

[ADR82a] Alain Aspect, Jean Dalibard és Gérard Roger, *Experimental test of Bell's inequalities using time-varying analyzers*, Phys. Rev. Lett. **49** (1982), no. 25, 1804–1807. MR 84c:81001 4

[ADR82b] A. Aspect, J. Dalibard és G. Roger, *Experimental realization of the Einstein–Podolsky–Rosen–Bohm Gedankenexperiment: a new violation of Bell's inequalities*, Phys. Rev. Letters **49** (1982), 91–94. 4

[BC94] Samuel L. Braunstein és Carlton M. Caves, *Statistical distance and the geometry of quantum states*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994), no. 22, 3439–3443. MR 95d:81010 39

[BDF+99] Charles H. Bennett, David P. DiVincenzo, Christopher A. Fuchs, Tal Mor, Eric Rains, Peter W. Shor, John A. Smolin és William K. Wootters, *Quantum nonlocality without entanglement*, Phys. Rev. A (3) **59** (1999), no. 2, 1070–1091. MR 99m:81027 12

[BNGJ03] Ole E. Barndorff-Nielsen, Richard D. Gill és Peter E. Jupp, *On Quantum Statistical Inference*, Kiadatlan., 2003. 9, 11, 33, 41, 42

[Čen82] N. N. Čencov, *Statistical decision rules and optimal inference*, Translations of Mathematical Monographs, vol. 53, American Mathematical Society, Providence, R.I., 1982. MR 83g:62004 43

[FLS70] R. P. Feynman, R. B. Leighton és M. Sands, *A kvantumfizika alapjai. Kétállapotú rendszerek*, 1. kiadás, Mai fizika, vol. 8, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1970. 6

[Hel76] C. W. Helstrom, *Quantum Detection and Information Theory*, Academic Press, New York, 1976. 40

[Hol82] A. S. Holevo, *Probabilistic and statistical aspects of quantum theory*, North-Holland Series in Statistics and Probability, vol. 1, North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1982. MR 85i:81038a 3, 6, 7, 17, 24, 33, 35

[HP82] Frank Hansen és Gert Kjaergård Pedersen, *Jensen's inequality for operators and Löwner's theorem*, Math. Ann. **258** (1981/82), no. 3, 229–241. MR 83g:47020 46

[KA80] Fumio Kubo és Tsuyoshi Ando, *Means of positive linear operators*, Math. Ann. **246** (1979/80), no. 3, 205–224. MR 84d:47028 48

[KM98] B. Kümmerer és H. Maassen, *Elements of quantum probability*, Quantum probability communications, QP-PQ, vol. X, World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1998, 73–100. o. MR 2000j:81030 2

[Leh97] E. L. Lehmann, *Theory of point estimation*, Springer-Verlag, New York, 1997. MR 98c:62003 28

[Mar71] Marx György, *Kvantummechanika*, 3. kiadás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1971. 6

[MC89] E. A. Morozova és N. N. Chentsov, *Markov-invariàns geometria állapot-sokaságokon (orosz nyelven)*, Itogi Nauki i Tekhniki, vol. 36, Akad. Nauk SSSR Vsesoyuz. Inst. Nauchn. i Tekhn. Inform., Moscow, 1989, 69–102, 187. o. MR 91j:46077 45

[Oza85] Masanao Ozawa, *Conditional probability and a posteriori states in quantum mechanics*, Publ. Res. Inst. Math. Sci. **21** (1985), no. 2, 279–295. MR 86f:81009 10, 11

[Pet86] Petz Dénes, *Quasi-entropies for finite quantum systems*, Rep. Math. Phys. **23** (1986), no. 1, 57–65. MR 88a:46079 46

[Pet96] _____, *Monotone metrics on matrix spaces*, Linear Algebra Appl. **244** (1996), 81–96. MR 97f:15056 47

[Pet98] _____, *Information-geometry of quantum states*, Quantum probability communications, QP-PQ, vol. X, World Sci. Publishing, River Edge, NJ, 1998, 135–157. o. 47

[Pet00] _____, *Lineáris Analízis*, Jegyzet, BME, Budapest, 2000. 53

[Zac71] Shelemyahu Zacks, *The theory of statistical inference*, John Wiley & Sons Inc., New York, 1971. MR 54 #8934a 28