

熱力学的不確定性関係

大上由人

2024 年 8 月 21 日

1 熱力学的不確定性関係

1.1 Main Claim

記号

$\hat{\mathcal{J}}_{ij} = \sum_n (\delta_{\omega_j \rightarrow \omega_i}(\omega^{n-1} \rightarrow \omega^n) - \delta_{\omega_i \rightarrow \omega_j}(\omega^{n-1} \rightarrow \omega^n))$: j から i への確率流を時間積分したもの
 $\hat{\mathcal{J}}_d = \sum_{(i,j)} d_{ij} \hat{\mathcal{J}}_{ij}$: 一般の物理量のカレントを時間積分したもの

例: 熱流の場合は $d_{ij} = E_i - E_j$ とすればよい

また、jump quantity としては以下のように定義される

$$\hat{J}_{ij}(t) = R_{ij}p_j(t) - R_{ji}p_i(t) \quad (1.1)$$

$$\hat{J}_d(t) = \sum_{(i,j)} d_{ij} \hat{J}_{ij}(t) \quad (1.2)$$

このとき、以下の定理が成り立つことが知られている:

Thm: 熱力学的不確定性関係

定常 Markov 過程が局所詳細釣り合いを満たすとき、以下の関係が成り立つことが知られている:

$$\frac{\text{Var}(\mathcal{J}_d)}{(\mathcal{J}_d^{\text{ss}})^2} \sigma \geq 2 \quad (1.3)$$

ただし、

$$\text{Var}(\mathcal{J}_d) = \left\langle \left(\hat{\mathcal{J}}_d - \langle \hat{\mathcal{J}}_d \rangle \right)^2 \right\rangle \quad (1.4)$$

である。

Def: Fisher 情報量

パラメータ θ についての確率分布 $P_\theta(x)$ が与えられたとき、Fisher 情報量 $F(\theta)$ は以下のように定義される:

$$F(\theta) = - \left\langle \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \log P_\theta(x) \right\rangle = \left\langle \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log P_\theta(x) \right)^2 \right\rangle \quad (1.5)$$

Def: 不偏推定量

$g(x)$ がパラメータ $f(\theta)$ の不偏推定量であるとは、

$$f(\theta) = \langle g(x) \rangle = \int dx g(x) P_\theta(x) \quad (1.6)$$

が成り立つことをいう。

Thm: 一般化クラメル-ラオの不等式

$g(x)$ がパラメータ $f(\theta)$ の不偏推定量であるとき、

$$\text{Var}_\theta(g(x)) \geq \frac{(f'(\theta))^2}{F(\theta)} \quad (1.7)$$

が成り立つ。

Prf

$$\text{Var}_\theta g(x) F(\theta) = \left(\int dx (g(x) - f(\theta))^2 P_\theta(x) \right) \left(\int dx \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log P_\theta(x) \right)^2 P_\theta(x) \right) \quad (1.8)$$

$$\geq \left(\int dx (g(x) - f(\theta)) \frac{\partial}{\partial \theta} (\ln P_\theta(x)) P_\theta(x) \right)^2 \quad \because \text{Cauchy-Schwarz の不等式} \quad (1.9)$$

$$= \left(\int dx g(x) \frac{\partial}{\partial \theta} P_\theta(x) - \int dx f(\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} P_\theta(x) \right)^2 \quad (1.10)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \int dx g(x) P_\theta(x) \right)^2 \quad \because \text{第二項の積分は規格化条件より 0} \quad (1.11)$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial \theta} f(\theta) \right)^2 \quad (1.12)$$

□

Cor: クラメール-ラオの不等式

$g(x)$ がパラメータ θ の不偏推定量であるとき、

$$\text{Var}_\theta(g(x)) \geq \frac{1}{F(\theta)} \quad (1.13)$$

が成り立つ。

Prf

$f(\theta) = \theta$ として、 $f'(\theta) = 1$ とすればよい。

□

Prf(熱力学的不確定性関係)

$$R_{ij}^\theta = R_{ij} e^{\theta Z_{ij}} \quad i \neq j \quad (1.14)$$

$$R_{ii}^\theta = - \sum_{j \neq i} R_{ij}^\theta e^{\theta Z_{ij}} \quad (1.15)$$

$$(1.16)$$

とおく。このとき、