

Majorization

大上由人

2024 年 5 月 11 日

目次

1	リソース理論と確率熱力学の位置づけ	2
1.1	確率熱力学的アプローチ	2
1.2	リソース理論的アプローチ	2
1.3	確率熱力学とリソース理論の関係	3
2	古典的エントロピー及びダイバージェンス	4
2.1	古典的状态及び系	4
2.2	シャノンエントロピー及び KL ダイバージェンス	6
2.3	Rényi エントロピー及びダイバージェンス	8
2.4	フィッシャー情報量	15
3	Classical Majorization	19
3.1	Majorization	19
3.2	d-Majorization と Thermo-Majorization	21
3.3	連続変数の場合	24
4	古典熱力学への適応	26
4.1	第二法則と KL ダイバージェンス	26
4.2	非平衡状態への遷移の要する仕事	29
4.3	熱平衡状態への緩和で取り出せる仕事	31
4.4	平衡状態間の遷移における仕事	31

1 リソース理論と確率熱力学の位置づけ

非平衡状態の熱力学第二法則を考えるとときに、これまで二つのアプローチがとられてきた。

1.1 確率熱力学のアプローチ

確率熱力学においては、仕事の揺らぎを許した系を考え、ゆらぎの定理の系として、エントロピー生成の熱力学第二法則が導かれる。

1.2 リソース理論的アプローチ

リソース理論においては、外部からの仕事は完全に制御されたものとし、系の状態を変化させるために必要なリソースを考える。

Def: free state/free operation

何のコストもなしに得られる状態を free state、何のコストもなしに行える操作を free operation という。

熱力学においては、仕事や、非平衡状態が resource である。というのも、仕事によって非平衡状態を作り出すことができ、また、非平衡状態から仕事を取り出すことができるからである。

また、Gibbs 分布 (カノニカル分布) は、free state であり、緩和過程 (GPM) は free operation である。

さらに、monotone と呼ばれる概念も重要である。

Def: monotone

free operation に対して、単調に変化する量を monotone という。とくに、ある操作が可能かどうかの必要十分条件を与える monotone を complete monotone という。

ex: 従来の熱力学

従来の熱力学における resource、free state、free operation、(complete) monotone は以下のように対応する。

- resource: 仕事

- free state: 熱平衡状態
- free operation: 断熱操作
- (complete) monotone: エントロピー

1.3 確率熱力学とリソース理論の関係

両者は、出所や set up が異なるが、マクロ極限をとると、同じ第二法則が導かれる。

2 古典的エントロピー及びダイバージェンス

2.1 古典的状态及び系

必要な量を定義する。

Def: 状態を表す確率分布

古典的系における状態は確率分布

$$p = (p_1, p_2, \dots, p_d)^\top \quad (2.1)$$

で表される。ここで、 $p_i \geq 0$ かつ $\sum_{i=1}^d p_i = 1$ である。また、 d 次元の確率分布全体の集合を、 \mathcal{P}_d と表す。

また、その集合に属する一様分布を、

$$u = \left(\frac{1}{d}, \frac{1}{d}, \dots, \frac{1}{d} \right)^\top \quad (2.2)$$

と表す。

また、異なる確率分布の積を、

$$p \otimes q \in \mathcal{P}_{dd'} \quad p \in \mathcal{P}_d, q \in \mathcal{P}_{d'} \quad (2.3)$$

と表し、とくに、同じ確率分布の累乗を、

$$p^{\otimes n} \in \mathcal{P}_{d^n} \quad p \in \mathcal{P}_d \quad (2.4)$$

と表す。

Def:Supp

確率分布 $p = p_{i_i} \in \mathcal{P}_d$ に対して、 p の台を、

$$\text{spp}(p) = \{i \in [d] | p_i > 0\} \subset \{1, 2, \dots, d\} \quad (2.5)$$

と表す。また、

$$\text{rank}(p) = |\text{spp}(p)| \quad (2.6)$$

を、 p のランクという。とくに、 $\text{rank}(p) = d$ のとき、 p はフルランクであるという。

要するに、確率が 0 でないようなインデックスの集合を台と呼び、その要素数をランクと呼ぶ。

Def: 確率遷移行列

古典的な確率分布の時間発展は、確率遷移行列 T を用いて以下のように表される。

$$p'_i = \sum_{j=1} T_{ij} p_j \quad (2.7)$$

Prop: 確率遷移行列の性質

確率遷移行列 T は以下の性質を持つ。

$$\sum_{i=1}^d T_{ij} = 1 \quad (2.8)$$

Prf

略 (確率の規格化を利用する。)

□

Def: 二重確率遷移行列

確率遷移行列 T が、

$$\sum_{j=1} T_{ij} = 1 \quad (2.9)$$

をみたすとき、二重確率遷移行列という。

Prop: 二重確率遷移行列の特徴づけ

以下の二つは同値である。

1. T は二重確率遷移行列である。
2. 一様分布 u は T に対して不変である。すなわち、 $u = Tu$ である。

Prf

$$p'_i = \sum_{j=1} T_{ij} u_j \quad (2.10)$$

$$= \frac{1}{d} \sum_{j=1}^d T_{ij} \quad (2.11)$$

$$= \frac{1}{d} \cdot d \quad (2.12)$$

$$= 1 \quad (2.13)$$

であることからわかる。

Def: トレース距離

二つの確率分布 p, q のトレース距離は、

$$D(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d |p_i - q_i| \quad (2.14)$$

で定義される。

Prop: トレース距離の性質

トレース距離は、 T に対して非増加である。すなわち、

$$D(p, q) \geq D(Tp, Tq) \quad (2.15)$$

が成り立つ。

Prf

後により一般の証明をするため、ここでは省略する。

2.2 シャノンエントロピー及び KL ダイバージェンス

Def: シャノンエントロピー

確率分布 $p \in \mathcal{P}_d$ のシャノンエントロピーは、

$$S_1(p) = - \sum_{i=1}^d p_i \log p_i \quad (2.16)$$

で定義される。

Def: KL ダイバージェンス

二つの確率分布 $p, q \in \mathcal{P}_d$ の KL ダイバージェンスは、

$$S_1(p||q) = \sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{q_i} \quad (2.17)$$

で定義される。ただし、 $\text{supp}(p) \subset \text{supp}(q)$ でないときは、 $S_1(p||q) = \infty$ とする。

このとき、エントロピーと KL ダイバージェンスの関係がわかる。

Prop: エントロピーと KL ダイバージェンスの関係

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_1(p) = \ln(d) - S_1(p||q) \quad (2.18)$$

Prf

$$S_1(p||u) = \sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{\frac{1}{d}} \quad (2.19)$$

$$= \sum_{i=1}^d p_i \log dp_i \quad (2.20)$$

$$= \sum_{i=1}^d p_i \log d + \sum_{i=1}^d p_i \log p_i \quad (2.21)$$

$$= \log d - S_1(p) \quad (2.22)$$

であることからわかる。 □

これより、 $S_1(p) \leq \log d$ であることがわかる。

このとき、KL ダイバージェンスのテイラー展開は以下ようになる。

$$S_1(p||p - \Delta p) = \frac{1}{2} \sum_i \frac{(\Delta p_i)^2}{p_i} + O(\Delta p^3) \quad (2.23)$$

$$(2.24)$$

ここで、 $\sum_i \Delta p_i = 0$ を用いている。

Def:monotone

monotone とは、free operation に対して、増減しない量のことである。

Prop:KL ダイバージェンスの単調性

KL ダイバージェンスは、 $p' = Tp$ および $q' = Tq$ に対して、

$$S_1(p||q) \geq S_1(p'||q') \quad (2.25)$$

が成り立つ。

Prf

後に一般に示す。

注意されたいこととして、KL ダイバージェンスの単調性の逆はいえない。すなわち、単調性を満たすが、 $p' = Tp$ および $q' = Tq$ を満たすような T が存在しない場合がある。

次に、二重確率遷移行列について考える。このとき、KL ダイバージェンスの単調性と、

$$S_1(p) \leq S_1(Tp) \quad (2.26)$$

が成り立つ。

すなわち、二重確率遷移行列による時間発展は、エントロピーを増加させる。

Def: 相互情報量

二つの確率分布 $p, q \in \mathcal{P}_d$ の相互情報量は、

$$I_1(p_{AB})_{A:B} = S_1(p_A) + S_1(p_B) - S_1(p_{AB}) = S_1(p_{AB} \| p_A \otimes p_B) \geq 0 \quad (2.27)$$

で定義される。

この量は、A と B の相関を表す量である。

Prop: 相互情報量の性質

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$I_1(p_{AB})_{A:B} = 0 \Leftrightarrow p_{AB} = p_A \otimes p_B \quad (2.28)$$

が成り立つ。また、KL ダイバージェンスの単調性から、

$$I_1(p_{AB})_{A:B} \geq I_1(T_A \otimes T_B p_{AB})_{A:B} \quad (2.29)$$

が成り立つ。ただし、 $T_A \otimes T_B$ は、各 A, B に独立に作用する確率遷移行列である。

Prf

略 (過去のゼミ資料を参考せよ)

□

2.3 Rényi エントロピー及びダイバージェンス

シャノンエントロピーを包含する概念として、Rényi エントロピーがある。

Def: Rényi エントロピー

確率分布 $p \in \mathcal{P}_d$ の Rényi エントロピーは、 $0 \leq \alpha \leq \infty$ 、 $p \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p) = \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha \right) \quad (2.30)$$

で定義される。

また、ダイバージェンスについても、Rényi ダイバージェンスがある。

Def: Rényi ダイバージェンス

二つの確率分布 $p, q \in \mathcal{P}_d$ の Rényi ダイバージェンスは、 $0 \leq \alpha \leq \infty$ 、 $p \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) = \frac{1}{\alpha - 1} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha} \right) \quad (2.31)$$

で定義される。ただし、 $\text{supp}(p) \subset \text{supp}(q)$ でないときは、 $S_\alpha(p||q) = \infty$ とする。

これらの量が、たしかにシャノンエントロピーと KL ダイバージェンスを包含していることを示す。

Prop: Rényi エントロピーとシャノンエントロピーの関係

Rényi-1 エントロピーは、シャノンエントロピーに一致する。すなわち、

$$S_1(p) = S_\alpha(p)|_{\alpha=1} \quad (2.32)$$

が成り立つ。

Prf

$$S_\alpha(p)|_{\alpha=1} = -\lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{1 - \alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha \right) \quad (2.33)$$

$$= -\frac{d}{d\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha \right) |_{\alpha=1} \quad (2.34)$$

$$= -\frac{\sum_{i=1}^d p_i \log p_i}{\sum_{i=1}^d p_i} \quad (2.35)$$

$$= -\sum_{i=1}^d p_i \log p_i \quad (2.36)$$

$$= S_1(p) \quad (2.37)$$

であることからわかる。 □

Prop: Rényi ダイバージェンスとダイバージェンスの関係

Rényi-1 ダイバージェンスは、KL ダイバージェンスに一致する。すなわち、

$$S_\alpha(p||q)|_{\alpha=1} = S_1(p||q) \quad (2.38)$$

が成り立つ。

Prf

$$S_\alpha(p||q)|_{\alpha=1} = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\alpha - 1} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha} \right) \quad (2.39)$$

$$= \frac{d}{d\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha} \right) \Big|_{\alpha=1} \quad (2.40)$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^d q_i (p_i/q_i)^\alpha \log(p_i/q_i)}{\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha}} \Big|_{\alpha=1} \quad (2.41)$$

$$= \sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{q_i} \quad (2.42)$$

$$= S_1(p||q) \quad (2.43)$$

であることからわかる。 □

また、 $\alpha = 0, \infty$ の場合は重要らしいので、以下で確認する。

Prop: Rényi エントロピー/ダイバージェンスの極限

Rényi-0 エントロピーは、

$$S_0(p) = \log(\text{rank}(p)) \quad (2.44)$$

で定義される。また、Rényi- ∞ エントロピーは、

$$S_\infty(p) = -(\log \max_i p_i) \quad (2.45)$$

で定義される。また、Rényi-0 ダイバージェンスは、

$$S_0(p||q) = -\log \left(\sum_{i:p_i>0} q_i \right) \quad (2.46)$$

で定義される。また、Rényi- ∞ ダイバージェンスは、

$$S_\infty(p||q) = \log \left(\max_i \frac{p_i}{q_i} \right) \quad (2.47)$$

で定義される。

Prf

Prop: Rényi エントロピーと KL ダイバージェンスの関係

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p) = \frac{1}{1-\alpha} \log d - S_\alpha(p||u) \quad (2.48)$$

が成り立つ。

以下、Rényi ダイバージェンスについての性質を示す。

Prop: Rényi ダイバージェンスの非負性

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) \geq 0 \quad (2.49)$$

が成り立つ。また、 $0 < \alpha \leq \infty$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) = 0 \Leftrightarrow p = q \quad (2.50)$$

であり、また、 $\alpha = 0$ のとき、

$$S_0(p||q) = 0 \Leftrightarrow \text{supp}(p) \subset \text{supp}(q) \quad (2.51)$$

が成り立つ。

Prop: Rényi ダイバージェンスの単調性

任意の $p' = Tp, q' = Tq \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) \geq S_\alpha(p'||q') \quad (2.52)$$

が成り立つ。また、二重確率遷移行列に対して、

$$S_\alpha(p) \leq S_\alpha(Tp) \quad (2.53)$$

が成り立つ。

Prop: Rényi ダイバージェンスの単調性 (2)

$\alpha \leq \alpha'$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) \leq S_{\alpha'}(p||q) \quad (2.54)$$

が成り立ち、また、

$$S_\alpha(p) \geq S_{\alpha'}(p) \quad (2.55)$$

が成り立つ。

Lem:

f を下に凸な関数であるとし、 $p, q, p', q' \in \mathbb{R}^d$ がすべて正であるとする。もし、 $p' = Tp, q' = Tq$ であるとき、

$$\sum_{i=1}^d q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) \leq \sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (2.56)$$

が成り立つ。

Prf

Jensen の不等式より、

$$\sum_{j=1}^d q'_j f\left(\frac{p'_j}{q'_j}\right) \leq \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^d \frac{T_{ji} q_i}{q'_j} f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) = \sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (2.57)$$

である。 □

ここで、 $p, q \in \mathcal{P}_d$ として、 $f(x) = x \log x$ とすると、

$$S_1(p||q) \geq S_1(p'||q') \quad (2.58)$$

が成り立つ。これは、KL ダイバージェンスの単調性を示している。

Prf: (Rényi ダイバージェンスの非負性)

$f_\alpha(x) = x^\alpha$ とすると、 $1 < \alpha \leq \infty$ に対して、 $f_\alpha(x)$ は下に凸な関数である。

Jensen の不等式より

$$\sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \geq f\left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i}\right) = f(1) = 0 \quad (2.59)$$

である。両辺対数をとることにより、

$$\log\left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i}\right) \geq 0 \quad (2.60)$$

である。これを両辺 $\frac{1}{\alpha-1}$ かけることにより、

$$\frac{1}{\alpha-1} \log\left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i}\right) \geq 0 \quad (2.61)$$

である。したがって、

$$S_\alpha(p||q) \geq 0 \quad (2.62)$$

である。また、 $0 < \alpha < 1$ のときは、上の Jensen の不等式で不等号が逆になり、 $\frac{1}{\alpha-1}$ をかけるときにもう一度符号が逆になることに注意して、同様に示すことができる。

$\alpha = 0, 1, \infty$ の場合は、それぞれの定義から自明である。

□

Prf:(Rényi ダイバージェンスの単調性)

$1 < \alpha < \infty$ のとき、Lem で、 $f(x) = x^\alpha$ として示した不等式を用いると、

$$\sum_{i=1}^d q_i' \frac{p_i'^{\alpha}}{q_i'^{\alpha}} \leq \sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i^{\alpha}}{q_i^{\alpha}} \quad (2.63)$$

である。この両辺対数をとることにより、

$$\log \left(\sum_{i=1}^d p_i'^{\alpha} q_i^{1-\alpha} \right) \leq \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^{\alpha} q_i^{1-\alpha} \right) \quad (2.64)$$

である。したがって、

$$\frac{1}{\alpha-1} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i'^{\alpha} q_i^{1-\alpha} \right) \leq \frac{1}{\alpha-1} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^{\alpha} q_i^{1-\alpha} \right) \quad (2.65)$$

である。したがって、

$$S_\alpha(p||q) \geq S_\alpha(p'||q') \quad (2.66)$$

である。

$0 < \alpha < 1$ のときは、同様に示すことができる。

$\alpha = 0, 1, \infty$ の場合は、それぞれの定義から自明である。

□

Prf:(Rényi ダイバージェンスの単調性 (2))

$\alpha \leq \alpha'$ に対して、 $f(x) = x^{\frac{\alpha-1}{\alpha'-1}}$ とすると、この関数は、 $1 < \alpha < \alpha' < \infty$ に対して下に凸な関数であり、 $0 < \alpha < \alpha' < 1$ および $0 < \alpha < 1 < \alpha'$ に対して上に凸な関数である。

したがって、Jensen の不等式より、

$$S_\alpha(p||q) = \frac{1}{\alpha - 1} \log \left(\sum_{i=1} p_i \left(\frac{p_i}{q_i} \right)^{\alpha-1} \right) \quad (2.67)$$

$$= \frac{1}{\alpha - 1} \log \left(\sum_{i=1} p_i \left(\frac{p_i}{q_i} \right)^{(\alpha-1)(\frac{\alpha-1}{\alpha-1})} \right) \quad (2.68)$$

$$\leq \frac{1}{\alpha' - 1} \log \left(\sum_{i=1} p_i \left(\frac{p_i}{q_i} \right)^{\alpha'-1} \right) \quad (2.69)$$

$$= S_{\alpha'}(p||q) \quad (2.70)$$

である。

また、 $\alpha = 0, 1, \infty$ の場合は、それぞれの定義から自明である。

□

さらに、f-ダイバージェンスという概念がある。

Def:f-ダイバージェンス

$f(0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ を下に凸な関数とし、 $x = 1$ で $f(x)$ が狭義凸かつ $f(1) = 0$ であるとする。このとき、 $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$D_f(p||q) = \sum_{i=1}^d q_i f \left(\frac{p_i}{q_i} \right) \quad (2.71)$$

で定義される。

KL ダイバージェンスは、 $f(x) = x \log x$ のときの f-ダイバージェンスである。また、Rényi ダイバージェンスは、 $f(x) = x^\alpha$ として \log をとって $\frac{1}{\alpha-1}$ をかけたものである。

Prop:f-ダイバージェンスの非負性

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$D_f(p||q) \geq 0 \quad (2.72)$$

が成り立つ。また、

$$D_f(p||q) = 0 \Leftrightarrow p = q \quad (2.73)$$

が成り立つ。

Prf

Jensen の不等式より、

$$\sum_{i=1}^d q_i f \left(\frac{p_i}{q_i} \right) \geq f \left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i} \right) = f(1) = 0 \quad (2.74)$$

である。ことからわかる。

□

Prop:f-ダイバージェンスの単調性

任意の $p' = Tp, q' = Tq \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$D_f(p||q) \geq D_f(p'||q') \quad (2.75)$$

が成り立つ。

Prf

よくよく見ると、これは Lem で示した不等式と同じである。

□

2.4 フィッシャー情報量

以下、我々は、なめらかにパラメータ化された確率分布 $p(\theta)$ について考える。ただし、 θ の取りうる領域は、 \mathbb{R}^m の開部分集合である。

Def: フィッシャー情報量

$p(\theta) \in \mathcal{P}_d$ がフルランクであるとし、 $\theta \in \mathbb{R}^m$ をパラメータとする。このとき、フィッシャー情報量は $m \times m$ 行列で、

$$J_{p(\theta),kl} = \sum_{i=1}^d p_i(\theta) \partial_k [\log p_i(\theta)] \partial_l [\log p_i(\theta)] = \sum_{i=1}^d \frac{\partial_k p_i(\theta) \partial_l p_i(\theta)}{p_i(\theta)} \quad (2.76)$$

で定義される。

フィッシャー情報量は、f-ダイバージェンスの極限として得られる。

Prop: フィッシャー情報量の単調性

任意の確率遷移行列 T に対して、

$$J_{p(\theta)} \geq J_{Tp(\theta)} \quad (2.77)$$

が成り立つ。

Prf

$p' = Tp$ とし、 $c = (c^1, \dots, c^m) \in \mathbb{R}^m$ として、 $\partial = \sum_k c^k \partial_k$ とする。このとき、

$$c^\top J_{p(\theta)} c = \sum_i p_i \left(\frac{\partial p_i}{p_i} \right)^2 \quad (2.78)$$

$$c^\top J_{p'(\theta)} c = \sum_i p'_i \left(\frac{\partial p'_i}{p'_i} \right)^2 \quad (2.79)$$

$$(2.80)$$

である。したがって、Lemma で $f = x^2$ として示した不等式より、

$$c^\top J_{p(\theta)} c \geq c^\top J_{p'(\theta)} c \quad (2.81)$$

である。したがって、

$$J_{p(\theta)} \geq J_{Tp(\theta)} \quad (2.82)$$

である。

□

フィッシャー情報量の操作的な意味付けとして、Cramér-Rao の不等式がある。

Thm:Cramér-Rao の不等式

あるパラメータ θ に対する不偏推定量 θ_{est} に対して、不偏条件 $\sum_{i=1}^d p_i(\theta) \theta_{est}(i) = \theta$ が成り立つとする。このとき、正確さは共分散行列

$$Cov_{\theta}^{kl}(\theta_{est}) = \sum_{i=1}^d p_i(\theta) (\theta_{est}^k(i) - \theta^k) (\theta_{est}^l(i) - \theta^l) \quad (2.83)$$

により表現される。このとき、

$$Cov_{\theta}^{kl}(\theta_{est}) \geq (J_{p(\theta)})_{kl}^{-1} \quad (2.84)$$

が成り立つ。

すなわち、フィッシャー情報量は、 θ の不偏推定量が、フィッシャー情報量によって制限されることを示している。

例として、指数型分布族とよばれる確率分布の集合族を考える。簡単のために、パラメータを θ のみとし、

$$p_i(\theta) = h_i \exp(\theta T_i - A(\theta)) \quad (2.85)$$

であるとする。ただし、 $A(\theta)$ は、 θ のなめらかな関数である。このとき、簡単な計算により、

$$\sum_{i=1} T_i p_i(\theta) = A'(\theta) \quad \sum_{i=1} T_i^2 p_i(\theta) = A''(\theta) + A'(\theta)^2 \quad (2.86)$$

である。したがって

$$J_{p(\theta)} = A''(\theta) \quad (2.87)$$

である。

熱力学の文脈では、 $p_i(\theta)$ をギブス分布、 T_i をエネルギーとして、 $-\theta$ を逆温度として解釈することができる。そして、 $\theta^{-1}A(\theta)$ は、自由エネルギーである。すなわち、

$$p_i(\theta) = \frac{1}{Z(\theta)} \exp(-\theta E_i) \quad (2.88)$$

である。

また、(2.89) は、 T_i が、 $A'(\theta)$ の不偏推定量であることを示している。それに対応するフィッシャー情報量は、 $J_{p(\theta)} = A''(\theta)^{-1}$ である。というのも、 $\frac{d}{d\theta} = (A''(\theta))^{-1} \frac{d}{d\theta}$ であるからである。

また、情報幾何の文脈では、フィッシャー情報量は、確率分布空間の計量として考えられる。以下では、monotone 計量という概念を導入する。

Def: Monotone 計量

$G_p : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ が、フルランクの $p \in \mathcal{P}_d$ に対して、以下を満たすとき、 G_p は Monotone 計量であるという。

- G_p は双線形である。
- $G_p(a, a) \geq 0$ であり、 $G_p(a, a) = 0 \Leftrightarrow a = 0$ である。
- $p \mapsto G_p(a, a)$ は任意の a に対して連続である。
- 任意の T, a, p に対して、 $G_p(a, a) \geq G_{Tp}(Ta, Ta)$ が成り立つ。

このとき、特にフィッシャー情報計量は、

$$G_p^F(a, b) = \sum_{i=1}^d \frac{a_i b_i}{p_i} \quad (2.89)$$

で定義される。ただし、 $a = (a_1, \dots, a_d), b = (b_1, \dots, b_d)$ である。

この計量は、フィッシャー情報量行列と、

$$J_{p(\theta), kl} = G_{p(\theta)}^F(\partial_k p(\theta), \partial_l p(\theta)) \quad (2.90)$$

との関係がある。

Prop: フィッシャー情報量計量の単調性

任意の確率遷移行列 T に対して、

$$G_p^F(a, a) \geq G_{Tp}^F(Ta, Ta) \quad (2.91)$$

が成り立つ。

Prf

逆に、任意の monotone 計量は、フィッシャー情報量計量を用いて、以下のように表現できる。

Thm:Chentsov の定理

任意の monotone 計量 G_p は、フィッシャー情報量計量を用いて、

$$G_p(a, b) = kG_p^F(a, b) + k' \left(\sum_{i=1}^d a_i \right) \left(\sum_{i=1}^d b_i \right) \quad (2.92)$$

と表現できる。ただし、 $k, k' \geq 0$ である。

Prf

略

3 Classical Majorization

状態の遷移可能性は、majorization によって、必要十分に特徴づけられる。

3.1 Majorization

Def:Majorization

$p, p' \in \mathcal{P}_d$ に対して、 p が p' を majorize することを、 $p' \prec p$ と書き、

$$\forall k \in \{1, \dots, d\} \quad \sum_{i=1}^k p_i'^{\downarrow} \leq \sum_{i=1}^k p_i^{\downarrow} \quad (3.1)$$

が成り立つとき、 p が p' を majorize するという。ただし、 p^{\downarrow} は、 p の要素を降順に並べたものである。

Majorization は、 p と p' の確率分布を比較したときに、ばらつきの大きさを比較する量である。

Majorization を図に表すと、以下のローレンツ曲線で表現される。

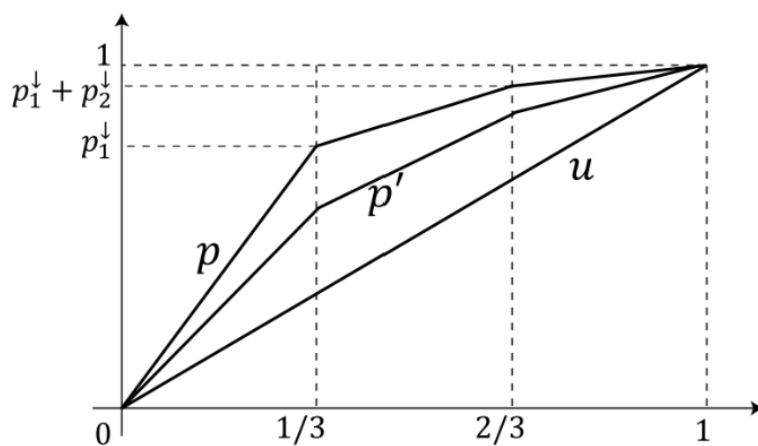


図 1 Majorization の図示

図でいうところの、下に来ている曲線が、よりばらつきが小さい確率分布であり、とくに一様分布のときは直線になることがわかる。すなわち、

$$u \prec p \quad \forall p \in \mathcal{P}_d \quad (3.2)$$

である。

注意すべきこととして、この \prec は全順序ではない。すなわち、ある確率分布の組 p, p' に対して、 $p \prec p'$ か $p' \prec p$ のどちらも成り立たない場合がある。このとき、ローレンツ曲線は交わる。

Thm:Majorization の特徴づけ

$p, p' \in \mathcal{P}_d$ に対して、以下は同値である。

1. $p' \prec p$
2. $\forall t \in \mathbb{R} \quad \sum_{i=1}^d |p'_i - t| \leq \sum_{i=1}^d |p_i - t|$
3. 任意の下に凸な関数 f に対して、

$$\sum_{i=1}^d f(p'_i) \leq \sum_{i=1}^d f(p_i) \quad (3.3)$$

4. $p' = Tp$ となる二重確率遷移行列 T が存在する。

Prf

この証明は後で行う。

3 についての補足

また、一様分布は、二重確率遷移行列のもとで不変である。熱力学の文脈では、 u は高温極限をとった時の Gibbs 分布に対応している。このとき、二重確率遷移行列は、そのような Gibbs 分布を保つものである。

Thm:Birkhoff の定理

以下の二つは同値である。

1. T は二重確率遷移行列である。
2. T は、置換行列の凸結合で表現できる。すなわち、

$$T = \sum_k r_k P_k \quad (3.4)$$

である。ただし、 $r_k \geq 0$ であり、 $\sum_k r_k = 1$ である。また、 P_k は、置換行列である。

Prf

教科書で証明されていないので一旦飛ばす。

Prop: 二重確率遷移行列の性質

$$\text{「} T \text{ が二重確率遷移行列である」} \Leftrightarrow Tp \prec p \quad \forall p \in \mathbb{R}^d \quad (3.5)$$

Prf

Def:Schur 凸性

$F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ が Schur 凸であるとは、

$$\forall p, p' \in \mathcal{P}_d \quad p' \prec p \Rightarrow F(p') \leq F(p) \quad (3.6)$$

が成り立つことである。言い換えると、Schur 凸な関数は、majorization に関して単調である。

Prop:

$F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ が Schur 凸かつ微分可能なことと、 F が転置に対して不変なこと、すなわち、

$$F(p) = F(Pp) \quad \forall p, P \quad (3.7)$$

が成り立つことは同値であり、また、

$$\forall p \in \mathcal{P}_d \quad (p_i p_j) \left(\frac{\partial F}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_j} \right) \geq 0 \quad (3.8)$$

も同値である。

Prf

3.2 d-Majorization と Thermo-Majorization

先ほどまでは、一つの分布についての遷移について考えていたが、次は、二つの分布の組の遷移を考える。

このとき、 $p^* = (p_1^*, \dots, p_d^*)^\top, q^* = (q_1^*, \dots, q_d^*)^\top$ を、 $p = (p_1, \dots, p_d)^\top, q = (q_1, \dots, q_d)^\top$ を $\frac{p_1^*}{q_1^*} \geq \frac{p_2^*}{q_2^*} \geq \dots \geq \frac{p_d^*}{q_d^*}$ が成り立つように並べ替えたものとして定義する。この新しく定義した p^*, q^* に対して横軸を $\sum_{i=1}^k q_i^*$ 、縦軸を $\sum_{i=1}^k p_i^*$ としたローレンツ曲線を考える。図は以下のようになる。

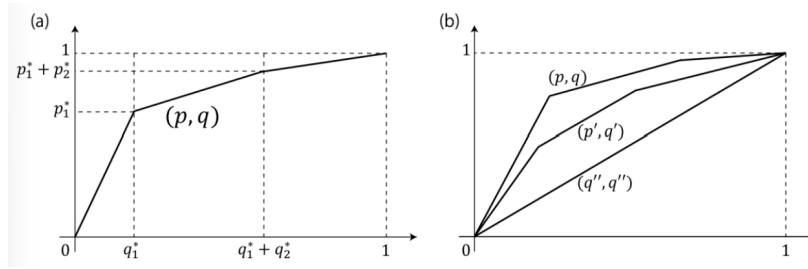


図 2 d-Majorization の図示

Def:d-Majorization

$p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$(p', q') \prec (p, q) \Leftrightarrow \text{「}(p, q) \text{ のローレンツ曲線が } (p', q') \text{ のローレンツ曲線の上に来る」} \quad (3.9)$$

が成り立つとき、 (p, q) は (p', q') を d-majorize するという。

d-majorization は、以下のような言い換えが可能である。

Thm:Blackwell の定理

$p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$ かつ q, q' がフルランクであるとき、以下は同値である。

1. $(p', q') \prec (p, q)$
- 2.

$$\forall t \in \mathbb{R} \quad \sum_{i=1}^d |p'_i - tq'_i| \leq \sum_{i=1}^d |p_i - tq_i| \quad (3.10)$$

3. 任意の下に凸な関数 f に対して、

$$\sum_{i=1}^d q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) \leq \sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (3.11)$$

4. ある二重確率遷移行列 T が存在して、

$$p' = Tp \quad q' = Tq \quad (3.12)$$

が成り立つ。

Prf

後で証明を行う。

Def: Thermo-Majorization

$p, q, p' \in \mathcal{P}_d$ に対して、 p が q について p' を thermo-majorize するとは、

$$(p', q) \prec (p, q) \quad (3.13)$$

が成り立つことである。

(q, q) のローレンツ曲線は、直線であるため、 q は任意の p について thermo-majorize される。すなわち、

$$\forall p \quad (q, q) \prec (p, q) \quad (3.14)$$

である。したがって、thermo-majorization は、確率分布 p が q にどれだけ近いかを表す。

とくに、熱力学の文脈では q はあるハミルトニアン H の Gibbs 分布であり、 $q = p^G$ とかける。^{*1} このとき、 $q = Tq$ であるとは、 T は、Gibbs 分布を変えない遷移行列であるということである。このような遷移行列を、Gibbs-preserving map という。

リソース理論の枠組みでは、GPM は、free operation として扱われ、Gibbs 分布は、free state として扱われる。

Thm: 遷移可能条件

$p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$ とし、 q, q' がフルランクであるとする。このとき、以下の二つが成り立つ。

$$1. \quad (p', q') \prec (p, q) \Leftrightarrow S_0(p||q) \geq S_0(p'||q') \quad S_\infty(p||q) \leq S_\infty(p'||q') \quad (3.15)$$

$$2. \quad S_\infty(p'||q') \leq S_0(p||q) \Leftrightarrow (p', q') \prec (p, q) \quad (3.16)$$

Prf

以下の図より明らかである。

^{*1} 任意のフルランクな q はあるハミルトニアンの Gibbs 分布であるらしい。

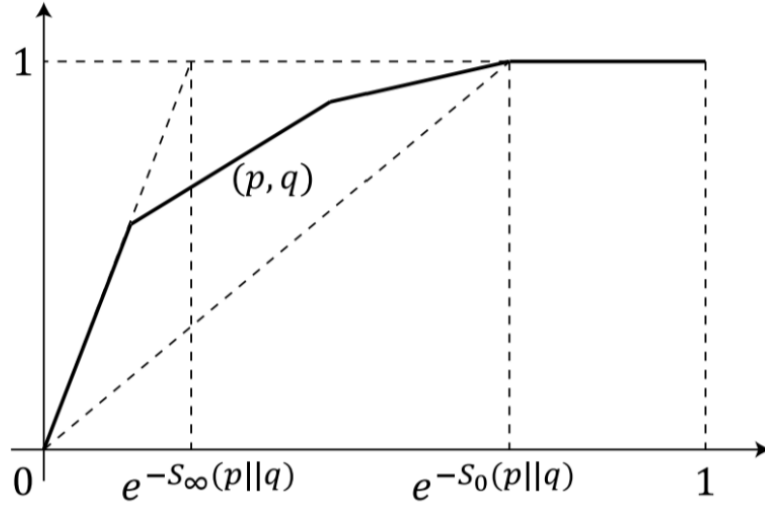


図3 遷移可能条件の図示

上の定理から明らかなように、Rényi divergence の観点からは、状態遷移と d-majorization に関する必要条件と十分条件は一致しない。

3.3 連続変数の場合

Majorization および d-majorization の連続変数の場合を考える。
簡単のため、 $x \in [0, 1]$ とする。

Def: 連続変数における Majorization

$p, p' \in L^1([0, 1])$ に対して、 p が p' を majorize することを、 $p' \prec p$ と書き、

$$\forall y \in [0, 1] \quad \int_0^y p'(x)^{\downarrow} dx \leq \int_0^y p(x)^{\downarrow} dx \quad (3.17)$$

が成り立つとき、 p が p' を majorize するという。ただし、

$$p^{\downarrow}(x) = \sup\{y : m_p(y) > x\} \quad (3.18)$$

$$m_p(y) = \mu[x : p(x) > y] \quad (3.19)$$

$$\mu : \text{Lebesgue measure} \quad (3.20)$$

である。^a

^a ルベグ積分が分からないせいで全然納得できない。

Def: 二重確率遷移写像

$T : L^1([0, 1]) \rightarrow L^1([0, 1])$ が二重確率遷移写像であるとは、

$$\forall p \in L^1([0, 1]) \quad Tp \prec p \tag{3.21}$$

が成り立つことである。

4 古典熱力学への適応

古典熱力学との対応を見ていく。

4.1 第二法則と KL ダイバージェンス

熱力学第二法則が、KL ダイバージェンスの単調性に由来することを確認する、 E_i を、系の i 番目の状態のエネルギーとし、Gibbs 状態 $p^G \in \mathcal{P}_d$ を、 $p_i^G = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ で定義する。ただし、 Z は正規化定数である。また、平衡状態での自由エネルギーは、 $F = -\beta^{-1} \log Z$ である。また、GPM は、

$$p^G = T p^G \quad (4.1)$$

であった。

Prop: 詳細つり合い条件と GPM

系が詳細つり合い条件

$$T_{ji} e^{-\beta E_i} = T_{ij} e^{-\beta E_j} \quad (4.2)$$

を満たすならば、 T は GPM である。

Prf

$$\sum_j T_{ij} p_j = \sum_j T_{ji} p_i \quad (4.3)$$

$$= p_i \quad (\because \sum_j T_{ji} = 1) \quad (4.4)$$

からわかる。 □

以下、 $\beta \geq 0$ を逆温度とする。KL ダイバージェンスの単調性を用いると、

$$S_1(p \| p^G) \geq S_1(Tp \| p^G) \quad (4.5)$$

$$(4.6)$$

となることがわかる。KL ダイバージェンスの定義より、

$$S_1(p||p^G) = \sum_{i=1}^d p_i \log \left(\frac{p_i}{p_i^G} \right) \quad (4.7)$$

$$= \sum_{i=1}^d p_i \log(p_i) + \beta \sum_{i=1}^d p_i E_i \quad (4.8)$$

$$= -S(p) + \beta \sum_{i=1}^d p_i E_i \quad (4.9)$$

同様にして、

$$S_1(Tp||p^G) = -S(Tp) + \beta \sum_{i=1}^d (Tp)_i E_i \quad (4.10)$$

$$(4.11)$$

である。したがって、

$$S(Tp) - S(p) \geq \beta \left(\sum_{i=1}^d E_i (Tp)_i - \sum_{i=1}^d E_i p_i \right) \quad (4.12)$$

である。右辺を観察してみると、遷移前後のエネルギーの期待値の差が現れていることがわかる。ここで、

$$Q = \sum_{i=1}^d E_i (Tp_i - \sum_{i=1}^d E_i p_i) \quad (4.13)$$

と定義すると、

$$\Delta S = S(Tp) - S(p) \geq \beta Q \quad (4.14)$$

と書くことができる。これは、クラウジウス不等式と呼ばれ、熱力学第二法則を表す。ただし、注意したいこととしては、左辺はシャノンエントロピーという、情報理論の文脈でのエントロピーである。

以上の議論を踏まえると、 T という、Gibbs 分布を保つ遷移がおこるとき、分布を保つために熱浴との相互作用が起こり、エントロピーが増大することがわかる。

Rem

上の熱について、 $Q_{ji} = E_j - E_i$ を、状態 j から i への遷移の際の熱の変化量とすると、

$$Q = \sum_{i,j} T_{ji} p_i Q_{ji} \quad (4.15)$$

と書くことができる。

確率熱力学の文脈では、

$$\Sigma = S_1(p||p^G) - S_1(Tp||p^G) = \Delta S - \beta Q \geq 0 \quad (4.16)$$

をエントロピー生成と呼ぶ。とくに、 $\Delta S - \beta Q$ は、熱浴のエントロピー増加ととらえられる。

つぎに、仕事と自由エネルギーについての第二法則を見ていく。いま、系のハミルトニアンは時間依存するとし、系への仕事はハミルトニアンの時間変化により実現されたとする。ここで、ハミルトニアンは、仕事浴めによって変化するのではなく、外部操作によって駆動すると考える。

まず、クエンチによって駆動される系を考える。いま、 $E = \sum_i E_i p_i$, $E' = \sum_i E'_i p_i$ がクエンチ前後での系のエネルギーの期待値あるとする。また、クエンチによってなされる仕事の平均は、

$$W = E' - E \quad (4.17)$$

と書かれる。

Rem

このセットアップでは、仕事は揺らぐ量であることに注意したい。すなわち、確率的な仕事を $w_i = E'_i - E_i$ として、

$$W = \sum_i w_i p_i \quad (4.18)$$

である。

次に、より一般的な熱力学過程を考える。全体の過程が、複数のクエンチおよび緩和過程によって構成されたと考える。クエンチとクエンチの間では、ハミルトニアンは一定であるとする。また、各緩和過程は確率的に独立であるとし、そのときのハミルトニアンに対応する GPM によって記述されると仮定する。以上の過程を図示すると以下ようになる。

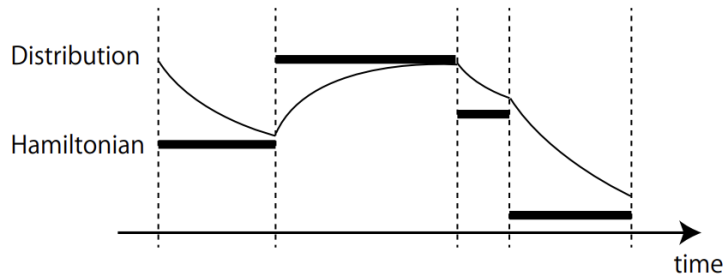


図4 熱力学過程の図示

全体の過程についての始状態と終状態を p, p' とし、ハミルトニアンを H, H' とする。また、Gibbs 状態を p^G, p'^G として、ヘルムホルツ自由エネルギーを F, F' とする。^{*2}

上の過程における、平均の仕事と熱について考える。 $\Delta E = E' - E$, $E = \sum_i E_i p_i$, $E' = \sum_i E'_i p_i$ とすると熱力学第一法則が成り立つ。すなわち、

$$\Delta E = W + Q \quad (4.19)$$

^{*2} この自由エネルギーは、熱平衡状態にある時の自由エネルギーであることに注意されたい。

が成立する。このとき、クエンチは、一瞬で行われるので、その間に確率分布は変化せず、また、熱の交換も起こらないとみなせる。したがって、この過程において、熱力学第一法則に影響はない。この第一法則を用いると、第二法則は、

$$W \geq \Delta E - \beta^{-1} \Delta S_1 \quad (4.20)$$

と書くことができる。ここで、非平衡状態における自由エネルギーを以下のように定義する。

$$F_1(p; H) = \Delta E_i - \beta^{-1} \Delta S_1(p) = \beta^{-1} S_1(p || p^G) + F \quad (4.21)$$

このとき、

$$F_1(p; H) = F \Leftrightarrow p = p^G \quad (4.22)$$

である。この自由エネルギーの表式を用いることにより、

$$W \geq F_1(p'; H') - F_1(p; H) \quad (4.23)$$

と書くことができる。この不等式は、仕事の揺らぎを許すときの仕事の下限を与える。

4.2 非平衡状態への遷移の要する仕事

非平衡状態へ遷移する際に必要な仕事を、Thermo-Majorization を用いて考える。

p^G を、系の Gibbs 分布とし、 $p_i^G = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}$ で定義する。また、 p を、系の任意の状態とする。また、今、仕事浴が、二つのエネルギー準位 $0, w$ を持つとする。仕事浴の Gibbs 分布を r^G とし、 $r^G = (\frac{1}{1+e^{-\beta w}}, \frac{e^{-\beta w}}{1+e^{-\beta w}})^T$ とし、また、仕事浴の任意の状態を $r = (r_0, r_w)^T$ $r_0 + r_w = 1$ とする。また、はじめと最後の仕事浴のエネルギーが 0 か w で与えられているとして、エネルギーの変化はすべて w か $-w$ であるとする。M

以下、非平衡状態を作るための最小仕事を求める。ここで、系のハミルトニアンが初めと終わりで等しいことを仮定する。

始状態の系の確率分布は p^G であり、仕事浴の確率分布は、 $r^{up} = (0, 1)$ であるとする。このとき、SW 系 (着目系と仕事浴の合成系) の初期状態は、 $p^G \otimes r^{up}$ である。

また、終状態について、終状態の系の状態を p 、仕事浴の状態を $r^{down} = (1, 0)$ とする。このとき、SW 系の終状態は、 $p \otimes r^{down}$ である。

このとき、それぞれのテンソル積を書き下すと以下ようになる。

$$p^G \otimes r^{up} = (0, p_1^G, 0, p_2^G, \dots, 0, p_n^G) \quad (4.24)$$

$$p \otimes r^{down} = (p_1, 0, p_2, 0, \dots, p_n, 0) \quad (4.25)$$

また、ローレンツ曲線を書くために、 $p^G \otimes r^G$ を書き下すと、

$$p^G \otimes r^G = (p_1^G r^{G, down}, p_1^G r^{G, up}, p_2^G r^{G, down}, p_2^G r^{G, up}, \dots, p_n^G r^{G, down}, p_n^G r^{G, up}) \quad (4.26)$$

である。ここで、 $r^{G,up} = \frac{1}{1+e^{-\beta w}}$ 、 $r^{G,down} = \frac{e^{-\beta w}}{1+e^{-\beta w}}$ である。

以上の準備の下、ローレンツ曲線を描くことを考える。まず、初期状態についてのローレンツ曲線は、要素が0でないところから大きい順に足していけばよいことがわかる。また、終状態については、折れ線となる。これらを図示すると以下ようになる。

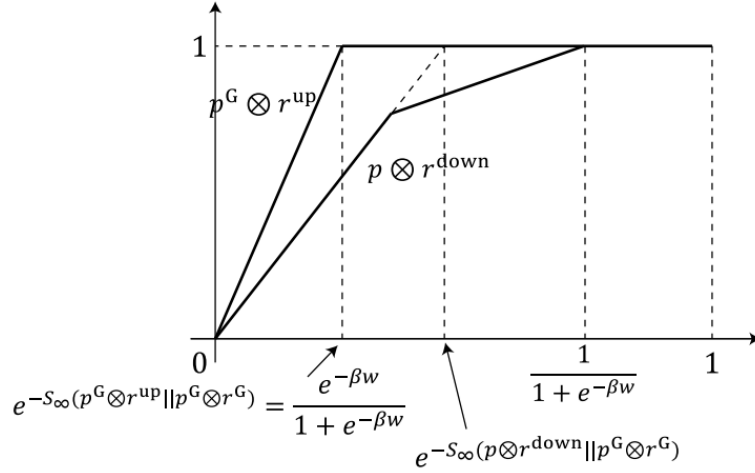


図5 非平衡状態への遷移の図示

したがって、非平衡状態への遷移が可能な必要十分条件は、

$$\frac{e^{-\beta w}}{1+e^{-\beta w}} \leq e^{-S_{\infty}(p \otimes r^{down} || p^G \otimes r^G)} \quad (4.27)$$

である。ここで、

$$S_{\infty}(p \otimes r^{down} || p^G \otimes r^G) = \ln(\max_i \frac{p_i \otimes r^{down}}{p_i^G \otimes r^{G,down}}) \quad (4.28)$$

$$= \ln(\max_i \frac{p_i}{p_i^G}) - \ln(r^{G,down}) \quad (4.29)$$

$$= S_{\infty}(p || p^G) - \ln(r^{G,down}) \quad (4.30)$$

であることを用いると、

$$\frac{e^{-\beta w}}{1+e^{-\beta w}} \leq \frac{1}{1+e^{-\beta w}} e^{-S_{\infty}(p || p^G)} \quad (4.31)$$

となる。整理して、

$$w \geq \beta^{-1} S_{\infty}(p || p^G) \quad (4.32)$$

となる。これが、平衡系から非平衡系への遷移に必要な最小仕事である。

4.3 熱平衡状態への緩和で取り出せる仕事

上と同様のことを考える。疲れたので図と結果だけを書く。

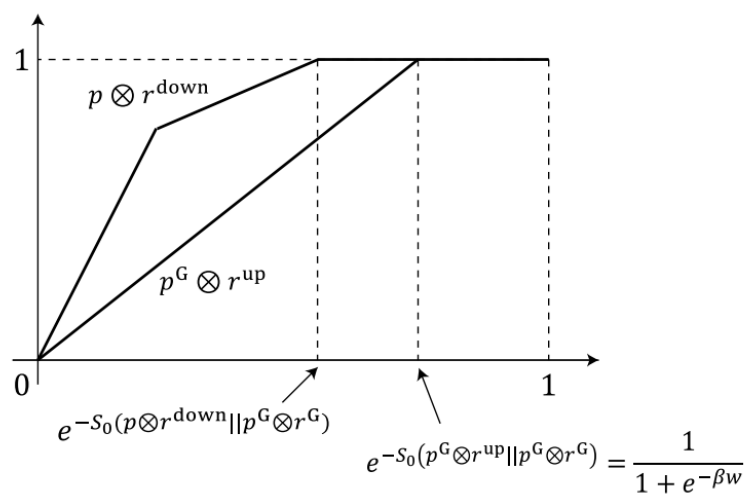


図 6 熱平衡状態への緩和の図示

$$-w \leq \beta^{-1} S_0(p || p^G) \quad (4.33)$$

である。これが、非平衡系から平衡系への遷移において取り出せる最大仕事である。

4.4 平衡状態間の遷移における仕事

hogehoge