熱力学的不確定性関係

大上由人

2024 年 8 月 12 日

1　熱力学的不確定性関係

1.1　Main Claim

記号

$\hat{\mathcal{J}}_{ij} = \sum_n (\delta_{\omega_j \to \omega_i}(\omega^{n-1} \to \omega^n) - \delta_{\omega_i \to \omega_j}(\omega^{n-1} \to \omega^n))$: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

$$\hat{J}_{ij}(t) = R_{ij} p_j(t) - R_{ji} p_i(t) \tag{1.1}$$
$$\hat{J}_d(t) = \sum_{(i,j)} d_{ij} \hat{J}_{ij}(t) \tag{1.2}$$

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 過程が局所詳細つ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:

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

ただし、

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

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:

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

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、

$$f(\theta) = \langle g(x) \rangle = \int \mathrm{d}x\, g(x) P_\theta(x) \tag{1.6}$$

が成り立つことをいう。

Thm: 一般化クラメール-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、

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

が成り立つ。

Prf

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}_\theta g(x) F(\theta) &= \left(\int \mathrm{d}x\, (g(x) - f(\theta))^2 P_\theta(x) \right) \left(\int \mathrm{d}x \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \log P_\theta(x) \right)^2 P_\theta(x) \right) && (1.8) \\
&\geq \left(\int \mathrm{d}x\, (g(x) - f(\theta)) \frac{\partial}{\partial\theta} (\ln P_\theta(x)) P_\theta(x) \right)^2 \quad \because \text{Cauchy-Schwarz の不等式} && (1.9) \\
&= \left(\int \mathrm{d}x\, g(x) \frac{\partial}{\partial\theta} P_\theta(x) - \int \mathrm{d}x\, f(\theta) \frac{\partial}{\partial\theta} P_\theta(x) \right)^2 && (1.10) \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial\theta} \int \mathrm{d}x\, g(x) P_\theta(x) \right)^2 \quad \because \text{第二項の積分は規格化条件より } 0 && (1.11) \\
&= \left(\frac{\partial}{\partial\theta} f(\theta) \right)^2 && (1.12)
\end{aligned}$$

□

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、

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

が成り立つ。

Prf

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

□