Prinzip der vorurteilsfreien Schätzung (Jaynes)

(unbiased guess)

Kontinuierliche Ereignismenge:

$$I(\varrho) = \int d^d x \, \varrho(x) \ln \varrho(x) \overset{!}{=} \text{Minimum}$$

unter den Nebenbed.

$$\int d^d x \, \varrho(x) = 1$$

$$\int d^d x \, \varrho(x) M^\nu(x) = \langle M^\nu \rangle$$

$$(\nu = 1, \dots, m)$$

Funktionalvariation $\delta\varrho(x)$:

$$\delta I = \int d^d x \, (\ln \varrho + 1) \delta\varrho$$

$$\int d^d x \, \delta\varrho = 0 \qquad | \, \psi = -(\lambda_0 + 1)$$

$$\int d^d x \, M^\nu(x) \delta\varrho = 0 \qquad | \, \lambda_\nu$$

$$\Rightarrow \int d^d x \, (\ln \varrho - \psi + \lambda_\nu M^\nu) \, \delta\varrho \overset{!}{=} 0$$

$$\Rightarrow \boxed{\varrho(x) = \exp(\psi - \lambda_\nu M^\nu(x))}$$

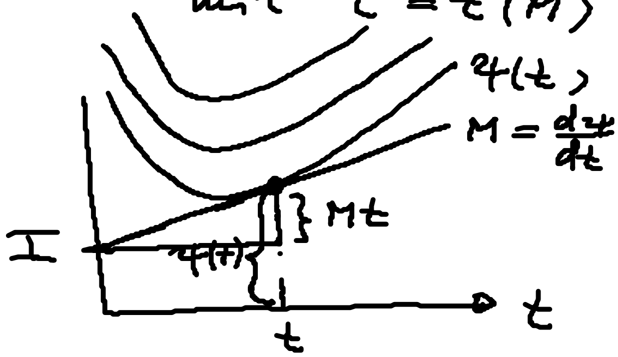
Eigenschaften der verallgem. kanon. Verteilung

(hier: rein informationstheoretisch
später: wichtige Anwendungen in der Thermodynamik)

Legendre-Transf.: Sei $\psi(t)$ eine Bahn.

Dann ist $M := \frac{d\psi}{dt}$ die Geschw.

Aus $\psi(M)$ läßt sich die Bahn $\psi(t)$ nicht rekonstruieren, jedoch aus $\boxed{I(M) = \psi(t) - Mt}$
mit $t = t(M)$:



eindeutig!

$$\frac{dI}{dM} = \frac{d\psi}{dt}\frac{dt}{dM} - \underbrace{M}_{\frac{d\psi}{dt}}\frac{dt}{dM} - t$$

$$\boxed{\frac{dI}{dM} = -t} \Rightarrow M(t)$$

$$\Rightarrow I(M) = \psi(t) - M(t)\,t \Rightarrow \psi(t)$$

$I(M)$ heißt Legendre-Transformierte von $\psi(t)$.

Anwendung auf verallg. kanon. Verteilung:

$$P_i = \exp\left(\psi - \lambda_\nu M_i^\nu\right)$$

Normierung: $\sum_i P_i = 1 \Rightarrow \boxed{e^{-\psi} = \sum_i \exp(-\lambda_\nu M_i^\nu) \equiv Z}$

also gilt $\psi = \psi(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$ und P_i ist durch $\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ vollständig parametrisiert.

NB: Die Verteilung P_i bzw. $\rho(x)$ wirkt auf dem Raum der Zufallsvariablen M_i^ν (diskret) bzw. $x \in \mathbb{R}^d$ (kontinuierlich).

$\lambda_1, \ldots, \lambda_m$ sind Parameter

$\langle M^\nu \rangle$ sind Erwartungswerte $\in \mathbb{R}$

Beispiel: $x = (q_1 \cdots q_{3N}, p_1 \cdots p_{3N}) \in \Gamma$ Phasenraum der kanon. konj. Var.

$$M(x) = \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(q_i)\right)$$ mikr. Hamiltonfkt.

$\langle M \rangle$ mittlere Energie

Shannon-Information:

$$I(P) = \sum_i P_i \ln P_i = \sum_i P_i (\psi - \lambda_\nu M_i^\nu) = \psi - \lambda_\nu \sum_i P_i M_i^\nu$$

$$\boxed{I = \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m) - \lambda_\nu \langle M^\nu \rangle}$$

Aus $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m) = -\ln \sum_i \exp(-\lambda_\mu M_i^\mu)$ folgt

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_\nu}\psi = -\frac{\sum_i (-M_i^\nu)\exp(-\lambda_\mu M_i^\mu)}{\underbrace{\sum_i \exp(-\lambda_\mu M_i^\mu)}_{e^{-\psi}}} = \sum_i M_i^\nu \underbrace{\exp(\psi - \lambda_\mu M_i^\mu)}_{P_i}$$

$$\boxed{\frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\nu} = \langle M^\nu \rangle}$$

Damit können wir die Legendre-Trafo identifizieren:

$\psi(t) \longrightarrow \psi(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$ Var. λ_ν

$M \longrightarrow \langle M^\nu \rangle = \frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\nu}$ neue Var. $\langle M^\nu \rangle$

$I(M) \longrightarrow I = \psi - \lambda_\nu \langle M^\nu \rangle$ Legendre-Trafo von ψ

Es folgt: $\boxed{\frac{\partial I}{\partial \langle M^\nu \rangle} = -\lambda_\nu}$

wegen $\frac{\partial I}{\partial \langle M^\nu \rangle} = \cancel{\underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\mu}}_{\langle M^\mu \rangle} \frac{\partial \lambda_\mu}{\partial \langle M^\nu \rangle} - \frac{\partial \lambda_\nu}{\partial \langle M^\nu \rangle} \langle M^\nu \rangle} - \lambda_\nu$

Zusammengefasst:

$K(P', P) = \sum_i P_i' \ln \frac{P_i'}{P_i}$

$$\boxed{dI = -\lambda_\nu \, d\langle M^\nu \rangle}$$

(Thermodyn.: Gibbs'sche Fundamentalgl.)

Betrachte Variation: $\langle M^\nu \rangle \to \langle M^\nu \rangle + \delta \langle M^\nu \rangle$

dann
$$\lambda_\nu \to \lambda_\nu + \delta\lambda_\nu$$
$$\psi \to \psi + \delta\psi$$
$$P_i \to P_i + \delta P_i$$

Informationsgewinn:

$$K(P+\delta P, P) = \underbrace{\sum_i (P_i+\delta P_i)\ln(P_i+\delta P_i)}_{I(P+\delta P)} - \sum_i (P_i+\delta P_i)\ln P_i$$

$$= (\cancel{\psi}+\delta\psi) - (\cancel{\lambda_\nu}+\delta\lambda_\nu)(\langle M^\nu\rangle + \delta\langle M^\nu\rangle) - \underbrace{\sum_i (P_i+\delta P_i)(\psi - \lambda_\nu M_i^\nu)}_{\cancel{\psi} - \lambda_\nu \underbrace{\sum_i (P_i+\delta P_i) M_i^\nu}_{\langle M^\nu\rangle + \delta\langle M^\nu\rangle}}$$

$$= \delta\psi - \delta\lambda_\nu(\langle M^\nu\rangle + \delta\langle M^\nu\rangle)$$

Entwickl. für kleine Var. $\delta\lambda_\nu$:

$$\delta\psi = \frac{\partial\psi}{\partial\lambda_\nu}\delta\lambda_\nu + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\lambda_\nu\partial\lambda_\mu}\delta\lambda_\nu\delta\lambda_\mu + \dots$$

$$\delta\langle M^\nu\rangle = \frac{\partial\langle M^\nu\rangle}{\partial\lambda_\mu}\delta\lambda_\mu + \dots$$

$$\Rightarrow K(P+\delta P, P) = \underbrace{\left(\frac{\partial\psi}{\partial\lambda_\nu} - \langle M^\nu\rangle\right)}_{=0}\delta\lambda_\nu + \left[\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda_\mu}\underbrace{\left(\frac{\partial\psi}{\partial\lambda_\nu}\right)}_{\langle M^\nu\rangle} - \frac{\partial\langle M^\nu\rangle}{\partial\lambda_\mu}\right]\delta\lambda_\mu\delta\lambda_\nu$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{\partial\langle M^\nu\rangle}{\partial\lambda_\mu}\delta\lambda_\mu\delta\lambda_\nu \overset{!}{\geq} 0$$

Also $\dfrac{\partial \langle M^\nu \rangle}{\partial \lambda_\mu} \delta\lambda_\mu \delta\lambda_\nu \leq 0$ <u>negativ semidefinite</u> Bilinearform $\forall \delta\lambda_\mu$

Definiere <u>Suszeptibilitätsmatrix</u>

$$\boxed{\chi^{\mu\nu} := \frac{\partial \langle M^\mu \rangle}{\partial \lambda_\nu}} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \lambda_\nu \partial \lambda_\mu}$$

(Änderung von $\langle M^\mu \rangle$ bei Var. von λ_ν: $\delta \langle \underline{M} \rangle = \underline{\underline{\chi}}\, \delta \underline{\lambda}$)

$$\tilde{\chi}_{\sigma\lambda} := \frac{\partial \lambda_\sigma}{\partial \langle M^\lambda \rangle} = -\frac{\partial^2 I}{\partial \langle M^\lambda \rangle \partial \langle M^\sigma \rangle}$$

($\delta \underline{\lambda} = \underline{\underline{\tilde{\chi}}}\, \delta \langle \underline{M} \rangle$)

$$\boxed{\underline{\underline{\tilde{\chi}}} = \underline{\underline{\chi}}^{-1}}$$

Wegen

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial \lambda_\mu} \Bigg(\underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\nu}}_{\langle M^\nu \rangle} \Bigg)}_{\chi^{\nu\mu}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial \lambda_\nu} \Bigg(\underbrace{\frac{\partial \psi}{\partial \lambda_\mu}}_{\langle M^\mu \rangle} \Bigg)}_{\chi^{\mu\nu}}$$

symmetrische Matrix

Aus $K(P+\delta P, P) \geq 0$ folgt

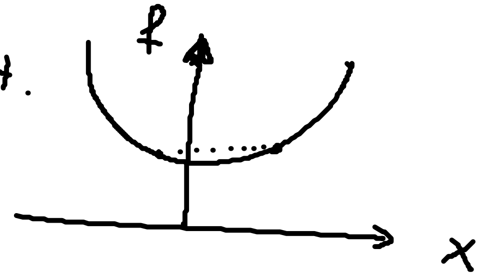
$$\boxed{\chi^{\mu\nu} \delta\lambda_\mu \delta\lambda_\nu = \delta \langle M^\nu \rangle \delta\lambda_\nu = \tilde{\chi}_{\nu\mu} \delta\langle M^\nu \rangle \delta \langle M^\mu \rangle \leq 0}$$

negativ-semidef. quadrat. Form

$\Rightarrow \chi^{\nu\nu} \leq 0 \,, \quad \tilde{\chi}_{\nu\nu} \leq 0$

<u>NB</u>: $\Rightarrow I(\langle M^\nu \rangle)$ und $-\psi(\lambda_\nu)$ <u>konvex</u> !

(konvexe Fkt.



$f''(x) \geq 0$)