Prinzip der vorurteilsfreien Schätzung (Jaynes)

(unbiased guess)

Kontinuierliche Ereignismenge:

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

unter den Nebenbed.

$$\int d^dx\, \rho(x) = 1$$

$$\int d^dx\, \rho(x)\, M^\nu(x) = \langle M^\nu \rangle \qquad (\nu = 1, \dots, m)$$

Funktionalvariation $\delta\rho(x)$:

$$\delta I = \int d^dx\, (\ln\rho + 1)\, \delta\rho$$

$$\int d^dx\, \delta\rho = 0 \qquad \Big|\ \psi = -(\lambda_0 + 1)$$

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

$$\Longrightarrow \int d^dx\, (\ln\rho - \psi + \lambda_\nu M^\nu)\, \delta\rho \overset{!}{=} 0$$

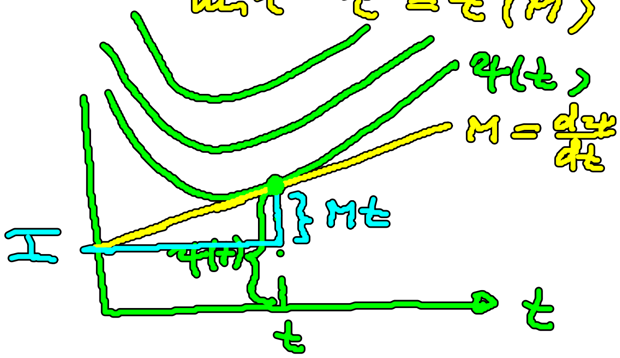
$$\Longrightarrow \boxed{\rho(x) = \exp\left(\psi - \lambda_\nu M^\nu(x)\right)}$$

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!

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

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

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

$I(M)$ heißt <u>Legendre-Transformierte</u> von $\psi(t)$.

<u>Anwendung auf verallg. kanon. Verteilung</u>:

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

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

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

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

$\lambda_1, \dots, \lambda_m$ sind Parameter

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

<u>Beispiel</u>: $x = (q_1 \cdots q_{3N}, p_1 \cdots p_{3N}) \in \Gamma$ 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:

$\Psi(t) \longrightarrow \Psi(\lambda_0, \dots, \lambda_n)$ 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 $\frac{\partial I}{\partial \langle M^\nu \rangle} = \cancel{\underbrace{\frac{\partial \Psi}{\partial \lambda_\mu}}_{\langle M^\mu \rangle} \frac{\partial \lambda_\mu}{\partial \langle M^\nu \rangle}} - \cancel{\frac{\partial \lambda_\nu}{\partial \langle M^\nu \rangle} \langle M^\nu \rangle} - \lambda_\nu$

Zusammengefasst:

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

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

(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:

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

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

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

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

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 $\frac{\partial\langle M^\nu\rangle}{\partial\lambda_\mu}\,\delta\lambda_\mu\,\delta\lambda_\nu \le 0$ negativ semidefinite Bilinearform $\forall\,\delta\lambda_\mu$

Definiere Suszeptibilitätsmatrix

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

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

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

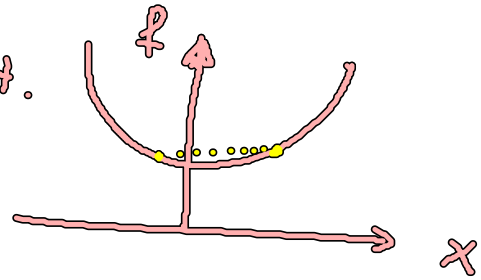
$$\boxed{\chi^{\mu\nu}\,\delta\lambda_\mu\,\delta\lambda_\nu = \delta\langle M^\nu\rangle\,\delta\lambda_\nu = \tilde{\chi}_{\nu\mu}\,\delta\langle M^\nu\rangle\,\delta\langle M^\mu\rangle \le 0}$$

negativ-semidef. quadrat. Form

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

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

(konvexe Fkt.



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